



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA

5
24



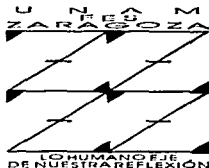
"ABSORCION NO ISOTERMICA DE BIOXIDO DE CARBONO EN SOLUCIONES ACUOSAS DE MONOETANOLAMINA EN UNA COLUMNA EMPACADA"

Incluye disco de 3 1/2

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
PRESENTA:

BERNARDO CARREON CALDERON



DIRECTOR DE TESIS
DR. SERGIO TREJO MARTINEZ

MEXICO, D. F.

1997

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

**FACULTAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES *ZARAGOZA*
JEFATURA DE INGENIERIA QUIMICA
OF/082/026/97**

**C. Bernardo Carreón Calderón
P r e s e n t e .**

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado para el Examen Profesional, le comunico que la Jefatura a mi cargo ha propuesto la siguiente designación:

Presidente: Dr. Sergio Trejo Martínez
Vocal: Fis. Carlos Javier Martínez Gómez
Secretario: M. en C. Roberto Mendoza Serna
Suplente: I.Q. José Bermúdez Mosqueda
Suplente: I.Q. Roberto Ramírez Torres

A T E N T A M E N T E
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
México, D.F., 2 de Septiembre 1997



Ing. Magín Enrique Juárez Villar
Jefe de la Carrera

Ira

DEDICATORIAS

A mi madre Luz María Calderón González, por su apoyo incondicional y firme educación, piedras angulares en mi formación profesional y humana.

A la memoria de mi padre Isaias Bernardo Carreón Espinoza, cuyo esfuerzo y sacrificio no han sido en vano.

A mi esposa Rosalba Bolaños Gómez por su gran amor y paciencia, valores importantes en mi vida presente y futura.

A mi hijo Bernardo Carreón Bolaños, esperanza de un mejor ser humano.

A mi hermano Narciso Carreón Calderón, compañero de infancia y amigo presente.

AGRADECIMIENTOS

A mis tíos por su apoyo moral y económico, que me alentaron a seguir luchando por alcanzar esta meta tan importante en mi vida, mi carrera profesional.

José Sergio Calderón González

Bidiulfo Esteban Amador Carreón

María del Rosario Calderón González

José Jaime Calderón González

José Baldemar Calderón González

A mi primo Germán Fernández Calderón, por ser mi mejor amigo.

A mis suegros Rosa María Bolaños Espino y Tomas Bolaños Zendejas por su ayuda y apoyo.

A mis asesores el Dr. Sergio Trejo Martínez y la profesora María Luisa por brindarme la oportunidad de trabajar con ellos.

Para todos mi infinito aprecio y eterno agradecimiento.

CONTENIDO

Índice de tablas	4
Índice de figuras	6
Resumen	7
Introducción	8
Capítulo 1 Ecuaciones fundamentales	10
1.1 Transferencia de masa en la fase líquida	10
1.2 Transferencia de masa en la fase gaseosa	14
1.3 Transferencia de calor interfacial	17
Capítulo 2 Solubilidad y calor de solución	20
2.1 Equilibrio físico-químico (CO ₂ -MEA-H ₂ O)	20
2.2 Calor de solución	23
Capítulo 3 Método de cálculo	26
3.1 Absorción en la columna empacada	26
3.2 Temperaturas de la fase líquida y gaseosa	29
Capítulo 4 Equipo y método	30
4.1 Equipo	30
4.2 Procedimiento	31
Capítulo 5 Análisis de resultados	33
5.1 Perfiles teóricos de concentración y temperatura	33
5.2 Comparación entre el porcentaje de absorción experimental y el determinado con el modelo no isotérmico y la aproximación isotérmica	35
5.3 Comparación entre la concentración de MEA experimental y la determinada teóricamente	41
5.4 Comparación entre el porcentaje de absorción experimental determinado en las corridas no adiabáticas y el determinado con las corridas adiabáticas	42
Conclusiones	46
Apendice A Hidráulica	48
A.1 Flujo de alimentación del gas	48
A.2 Flujo de alimentación del líquido	49
A.3 Capacidad de la columna	50
A.4 Retención del líquido	53
A.5 Área interfacial	54
Apendice B Coeficientes de transferencia de calor y masa	55

B 1. Altura de una unidad de transferencia (HTU)	55
B.2. Coeficientes de transferencia de calor	56
Apéndice C. Transferencia de calor con los alrededores	58
Apéndice D. Propiedades físicas	60
D.1. Viscosidad de la fase líquida	60
D 2 Densidad de la fase líquida	61
D 3 Coeficiente de difusión del CO ₂ en soluciones acuosas de MEA	63
D 4 Coeficiente de difusión de la MEA en soluciones acuosas de MEA	63
D 5 Viscosidad de la fase gaseosa	64
D 6 Densidad de la fase gaseosa	67
D 7 Coeficientes de difusión en la fase gaseosa	69
D.8 Capacidad calorífica de la fase líquida	70
D 9 Capacidad calorífica de la fase gaseosa	71
D 10 Tensión superficial	72
D.11 Conductividad térmica de la fase líquida	74
D 12 Conductividad térmica de la fase gaseosa	74
Apéndice E. Métodos Numéricos	76
E 1. Algoritmo de Newton Multivariable	76
E 2 Algoritmo de Gauss	77
Apéndice F. Tablas de resultados	79
Apéndice G. Práctica de laboratorio	89
Nomenclatura	91
Bibliografía	96

ÍNDICE DE TABLAS

1. Tabla 1.1. Velocidad de reacción del CO ₂ con la MEA y los iones OH ⁻	11
2. Tabla 2.1. Constantes de equilibrio para las reacciones (2.1) a (2.5)	21
3. Tabla 2.2. Constantes de equilibrio para las reacciones (2.6) a (2.9) y la constante de Henry	21
4. Tabla 2.3. Solubilidad del CO ₂ en 15.65% de MEA	23
5. Tabla 2.4. Solubilidad del CO ₂ en 15.3% de MEA	23
6. Tabla 2.5. Entalpías de formación en fase gaseosa	24
7. Tabla 2.6. Calores latentes de vaporización	24
8. Tabla A.1. Constante de la correlación generalizada para la caída de presión	51
9. Tabla D.1. Viscosidad del sistema MEA-H ₂ O	61
10. Tabla D.2. Densidad del sistema MEA-H ₂ O	62
11. Tabla D.3. Coeficientes de Chung	66
12. Tabla D.4. Propiedades críticas de los compuestos de la fase gaseosa	67
13. Tabla D.5. Viscosidad de los gases individuales	67
14. Tabla D.6. Parámetros de interacción binaria	69
15. Tabla D.7. Diámetro de colisión y parámetro de energía	70
16. Tabla D.8. Coeficientes de difusión binaria	70
17. Tabla D.9. Contribución de grupos para la capacidad calorífica molar del líquido	71
18. Tabla D.10. Capacidades caloríficas de gases ideales	71
19. Tabla D.11. Tensión superficial del agua	72
20. Tabla D.12. Contribuciones estructurales para calcular el Parachor	73
21. Tabla D.13. Conductividad térmica de los gases	74
22. Tabla F.1. Flujos de alimentación de las corrientes líquida y gaseosa para las corrientes no adiabáticas sin serpentín	79
23. Tabla F.2. Flujos de alimentación de las corrientes líquida y gaseosa para las corrientes adiabáticas	80
24. Tabla F.3. Flujos de alimentación de las corrientes líquida y gaseosa para las corrientes no adiabáticas con serpentín	80
25. Tabla F.4. Composición de la corriente gaseosa y porcentaje de absorción para las corrientes no adiabáticas sin serpentín	81
26. Tabla F.5. Composición de la corriente gaseosa y porcentaje de absorción para las corrientes adiabáticas	82
27. Tabla F.6. Composición de la corriente gaseosa y porcentaje de absorción para las corrientes no adiabáticas con serpentín	82

28. Tabla F.7. Composición de la corriente líquida para las corrientes no adiabáticas sin serpentín.....	83
29. Tabla F.8. Composición de la corriente líquida para las corrientes adiabáticas.....	84
30. Tabla F.9. Composición de la corriente líquida para las corrientes no adiabáticas con serpentín.....	84
31. Tabla F.10. Temperaturas de las corrientes líquida y gaseosa para las corrientes no adiabáticas sin serpentín.....	85
32. Tabla F.11. Temperaturas de las corrientes líquida y gaseosa para las corrientes adiabáticas.....	86
33. Tabla F.12. Temperaturas de las corrientes líquida y gaseosa para las corrientes no adiabáticas con serpentín.....	86
34. Tabla F.13. Caída de presión en la columna y factor de empaque para las corrientes no adiabáticas sin serpentín.....	87
35. Tabla F.14. Caída de presión en la columna y factor de empaque para las corrientes adiabáticas.....	88
36. Tabla F.15. Caída de presión en la columna y factor de empaque para las corrientes no adiabáticas con serpentín.....	88

ÍNDICE DE FIGURAS

1. Figura 1.1. Transferencia del CO_2 en soluciones acuosas de MEA.....	11
2. Figura 1.2. Transferencia simultánea de calor y masa.....	17
3. Figura 3.1. Esquema de la <i>j</i> -esma sección en la columna empacada.....	26
4. Figura 3.2. Diagrama de flujo para calcular la absorción en columna empacadas.....	28
5. Figura 4.1. Diagrama de la columna empacada y su equipo auxiliar.....	30
6. Figura 4.2. Curva de titulación para 5ml de una solución acuosa de MEA 15.3 % con HCl 1M.....	32
7. Figura 5.1. Perfiles de temperatura teóricos en condiciones no isotermicas.....	33
8. Figura 5.2. Perfiles de concentración teóricos del CO_2 y el H_2O en el gas.....	34
9. Figura 5.3. Contradifusión teórica a lo largo de la columna.....	34
10. Figura 5.4. Comparación entre el porcentaje de absorción experimental y el calculado con el modelo no isotermico y la aproximación isotermica, para las corrientes no adiabaticas.....	35
11. Figura 5.5. Comparación entre el porcentaje de absorción experimental y el calculado con el modelo no isotermico y la aproximación isotermica, para las corrientes adiabaticas.....	37
12. Figura 5.6. Comparación entre las temperaturas de las corrientes de salida del liquido y las calculadas teóricamente con el modelo no isotermico, para las corrientes no adiabaticas.....	38
13. Figura 5.7. Comparación entre las temperaturas de las corrientes de salida del liquido y las calculadas teóricamente con el modelo no isotermico, para las corrientes adiabaticas.....	39
14. Figura 5.8. Comparación entre las temperaturas experimentales de salida del gas y las calculadas teóricamente con el modelo no isotermico, para las corrientes no adiabaticas.....	40
15. Figura 5.9. Comparación entre las temperaturas experimentales de salida del gas y las calculadas teóricamente con el modelo no isotermico, para las corrientes adiabaticas.....	40
16. Figura 5.10. Curva de titulación para 5 ml de una solución acuosa de MEA 15 % y 0.2 moles de CO_2 / moles de MEA a 298.15 °K con HCl 1M.....	41
17. Figura 5.11. Comparación entre las corrientes experimentales no adiabaticas y adiabaticas.....	43
18. Figura 5.12. Curva de equilibrio a diferentes temperaturas para el sistema CO_2 -MEA- H_2O , en una solución de 15.3% peso de MEA.....	44
19. Figura A.1. Placa de orificio para determinar el flujo de alimentación del gas.....	48
20. Figura A.2. Rotámetro para determinar el flujo del liquido de alimentación.....	50
21. Figura A.3. Caída de presión en la columna para el sistema aire-agua, flujo de liquido 1606 kg /m ² h.....	52
22. Figura E.1. Diagrama de flujo del algoritmo de Gauss.....	78

RESUMEN

Se estudio experimentalmente la absorción de óxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina dentro de una columna empacada con anillos Raschig, bajo condiciones de operación adiabática y no adiabática, encontrándose que el efecto que tiene el aumento de temperatura en el sistema sobre el grado de absorción depende de la relación entre el número de moles del óxido de carbono absorbidos y el número de moles de monoetanolamina en la alimentación. Si esta relación es menor a 0.5 el incremento de temperatura en el sistema aumenta el grado de absorción, si la relación se encuentra alrededor de 0.5 el efecto que tiene el incremento de temperatura sobre el grado de absorción puede despreciarse, y si la relación es mayor a 0.5, disminuye el grado de absorción con el aumento de la temperatura. Los resultados de las 38 corridas experimentales para este sistema se compararon con las predicciones técnicas isotérmica y no isotérmica, encontrándose que el porcentaje de absorción puede predicarse con una desviación promedio aproximada de 25% por debajo del valor real, con un modelo no isotérmico. En el caso de la aproximación isotérmica, el porcentaje de absorción puede predicarse con una desviación promedio aproximada de 30% por debajo del valor real. El error que se comete al calcular el porcentaje de absorción con la aproximación isotérmica, en lugar del modelo no isotérmico, es de aproximadamente 9 %, siempre obteniéndose un porcentaje de absorción menor con la aproximación isotérmica que con el modelo no isotérmico.

INTRODUCCIÓN

La separación de uno o más componentes de una mezcla gaseosa por absorción en un líquido, es una de las operaciones más importantes en la industria química

Siempre que se diseña una columna para absorción, una de las consideraciones más importantes que se debe hacer es la concerniente al perfil de temperaturas a lo largo de la columna, puesto que la solubilidad de los componentes a separar depende en gran medida de la temperatura. La suposición más común que se hace para diseñar una columna de absorción, consiste en manejar al proceso en forma isotérmica, pero este modelo se encuentra lejos de representar la situación real, porque durante la absorción tienen lugar los siguientes fenómenos de generación y transferencia de calor: 1) Se presenta liberación de calor al absorberse los solutos, 2) En casos de solventes volátiles, la evaporación y condensación de estos se traduce en transferencia de calor entre las fases, 3) Ocurre transferencia de calor sensible entre el líquido y el gas, y por último, 4) Puede presentarse intercambio de calor sensible con los alrededores. En general todos estos efectos se traducen en incrementos de la temperatura de las fases, con lo cual la solubilidad de los compuestos de interés en equilibrio se reduce, y la recuperación que se puede alcanzar de estos es menor a la estimada con un modelo isotérmico.

El aumento de temperatura no sólo afecta la solubilidad de los solutos en el líquido, sino también la transferencia de calor y masa, que a su vez, determinan las concentraciones y temperaturas. De esta forma el cálculo de los procesos de absorción es muy complejo, con una gran interacción entre todas las variables del sistema, que sin la ayuda de una computadora, es muy difícil de determinar.

Entre los sistemas de absorción donde se liberan grandes cantidades de calor, se encuentran aquellos que incluyen reacciones químicas gas-líquido, pues el calor que se libera en la absorción no sólo incluye el calor latente de condensación y el calor de solución, sino también el calor liberado por las reacciones exotérmicas que tienen lugar. Uno de estos sistemas de absorción, que ha sido ampliamente estudiado, pero sólo de manera isotérmica^{26, 29}, es la absorción de dióxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina en el proceso de endulzamiento de gases amargos, dada la importancia creciente del control de las emisiones contaminantes en las plantas de proceso.

Por todo lo anterior, el estudio de la absorción bajo condiciones reales de operación (no isotérmicas) debe formar parte importante de la formación profesional de los ingenieros químicos, por lo que el propósito del presente trabajo es proporcionar las herramientas necesarias para el estudio de este importante proceso de separación. Para cumplir con este propósito se estudia experimentalmente la absorción del dióxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina, en una columna empacada bajo dos condiciones de operación térmicas (no adiabática y adiabática), esto con el fin de establecer las condiciones de operación en la columna que permitan elaborar una práctica de laboratorio para el estudio de la absorción de este sistema no isotérmico con fines didácticos. También para mostrar y comparar las diferencias existentes entre la realidad

INTRODUCCIÓN

La separación de uno o más componentes de una mezcla gaseosa por absorción en un líquido, es una de las operaciones más importantes en la industria química

Siempre que se diseña una columna para absorción, una de las consideraciones más importantes que se debe hacer es la concerning al perfil de temperaturas a lo largo de la columna, puesto que la solubilidad de los componentes a separar depende en gran medida de la temperatura. La suposición más común que se hace para diseñar una columna de absorción, consiste en manejar al proceso en forma isotérmica, pero este modelo se encuentra lejos de representar la situación real, porque durante la absorción tienen lugar los siguientes fenómenos de generación y transferencia de calor: 1) Se presenta liberación de calor al absorberse los solutos, 2) En casos de solventes volátiles, la evaporación y condensación de estos se traduce en transferencia de calor entre las fases, 3) Ocurre transferencia de calor sensible entre el líquido y el gas, y por último, 4) Puede presentarse intercambio de calor sensible con los alrededores. En general todos estos efectos se traducen en incrementos de la temperatura de las fases, con lo cual la solubilidad de los compuestos de interés en equilibrio se reduce, y la recuperación que se puede alcanzar de estos es menor a la estimada con un modelo isotérmico.

El aumento de temperatura no sólo afecta la solubilidad de los solutos en el líquido, sino también la transferencia de calor y masa, que a su vez, determinan las concentraciones y temperaturas. De esta forma el cálculo de los procesos de absorción es muy complejo, con una gran interacción entre todas las variables del sistema, que sin la ayuda de una computadora, es muy difícil de determinar.

Entre los sistemas de absorción donde se liberan grandes cantidades de calor, se encuentran aquellos que incluyen reacciones químicas gas-líquido, pues el calor que se libera en la absorción no sólo incluye el calor latente de condensación y el calor de solución, sino también el calor liberado por las reacciones exotérmicas que tienen lugar. Uno de estos sistemas de absorción, que ha sido ampliamente estudiado, pero sólo de manera isotérmica^{26,27}, es la absorción de dióxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina en el proceso de endulzamiento de gases amargos, dada la importancia creciente del control de las emisiones contaminantes en las plantas de proceso.

Por todo lo anterior, el estudio de la absorción bajo condiciones reales de operación (no isotérmicas) debe formar parte importante de la formación profesional de los ingenieros químicos, por lo que el propósito del presente trabajo es proporcionar las herramientas necesarias para el estudio de este importante proceso de separación. Para cumplir con este propósito se estudia experimentalmente la absorción del dióxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina, en una columna empacada bajo dos condiciones de operación térmicas (no adiabática y adiabática), esto con el fin de establecer las condiciones de operación en la columna que permitan elaborar una práctica de laboratorio para el estudio de la absorción de este sistema no isotérmico con fines didácticos. También para mostrar y comparar las diferencias existentes entre la realidad

(experimentos) y la teoría en el proceso de absorción del dióxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina, se elabora un programa de computadora (simulador) considerando la simplificación isotérmica usada en el diseño de las columnas de absorción. El simulador también incluye modelos más completos del fenómeno de absorción, en un caso considerando todos los efectos de transferencia y generación de calor que se presentan en los procesos de absorción reales, y en el otro manejando a la columna como adiabática.

CAPITULO I

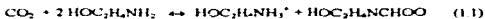
ECUACIONES FUNDAMENTALES.

1.1 Transferencia de masa en la fase líquida.

La absorción de bóxido de carbono (CO_2) en soluciones acuosas de monoetanolamina (MEA), tiene la peculiaridad de la presencia de reacciones químicas reversibles. Es evidente que las reacciones químicas afectan la transferencia de masa para la fase donde toman lugar, dado que modifican las concentraciones. Existe un gran número de métodos para cuantificar los efectos de las reacciones químicas sobre la transferencia de masa, en la gran mayoría de estos se utiliza el factor de aceleración (E) para calcular dichos efectos. En general, este factor de aceleración se define como la relación que existe entre la transferencia de masa que ocurre con reacciones químicas presentes, y la transferencia de masa que ocurre sin ninguna reacción química presente.

El modelo más simple para determinar el factor de aceleración es el modelo de la película de Whitman, en el cual se asume que hay una película delgada estancada de gas y líquido adyacente a la interfase gas-líquido. Este es un modelo de estado estacionario y considera que la resistencia a la transferencia de masa se localiza únicamente en estas dos películas. Este es el modelo utilizado para describir la transferencia de CO_2 de la fase gaseosa a la líquida en el presente trabajo.

En el estudio de la transferencia del CO_2 en soluciones acuosas de MEA se proponen las siguientes reacciones químicas reversibles



En principio cada una de las reacciones anteriores contribuye a la velocidad de reacción total del CO_2 . Sin embargo la velocidad de la reacción (1.3) es muy lenta comparada con las reacciones (1.1) y (1.2) ($k_3 = 0.026 \text{ s}^{-1}$ comparado con $k_1 = 3917.8 \text{ s}^{-1}$ y $k_2 = 8416.3 \text{ s}^{-1}$ a $298.15 \text{ }^\circ\text{K}$). De aquí la reacción (1.3) no se incorpora en el cálculo del factor de aceleración.

La reacción (1.2) también puede ser eliminada dada la baja concentración de iones OH^- presentes en las soluciones acuosas de MEA, como lo muestran los datos de Laddha¹⁰, que se muestran en la tabla 1.1.

Por lo anterior los balances microscópicos de masa necesarios para determinar la transferencia del CO_2 en soluciones acuosas de MEA y el factor de aceleración, sólo se realizan en base a la reacción número (1.1), para lo cual considerése la situación mostrada en la figura 1.1.

Tabla 1.1 Velocidades de reacción de CO₂ con la MEA y los iones OH⁻

C _{MEA} , kmol/m ³	k ₁ (C _{MEA}) + k ₂ (C _{OH}), s ⁻¹	k ₂ (C _{OH}), s ⁻¹	% de la velocidad total
0.49	2853	33	1.15
0.73	4109	40	0.97
0.98	5385	46	0.85
1.21	6980	51	0.73
1.48	9300	57	0.61
1.71	9556	61	0.64

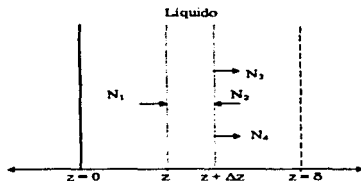


Figura 1.1 Transferencia del CO₂ en soluciones acuosas de MEA.

En la figura 1.1 se muestra la transferencia de las especies químicas de la reacción (1.1) en la zona interfacial. Los balances de materia para cada especie química de la reacción (1.1) en estado estacionario entre z y $z + \Delta z$ junto con la ley de Fick para la difusión ordinaria³⁸, dan el siguiente grupo de ecuaciones diferenciales simultáneas no lineales

$$\begin{aligned}
 D_1 \frac{d^2 C_1}{dz^2} &= \nu F_1 \\
 D_1 \frac{d^2 C_2}{dz^2} &= \nu F_1 \\
 D_1 \frac{d^2 C_3}{dz^2} &= \nu F_1 \\
 D_1 \frac{d^2 C_4}{dz^2} &= \nu F_1 \\
 r_1 &= k_1 C_1 C_2 - k_2 C_3 C_4
 \end{aligned}
 \tag{1.4}$$

Al resolver este sistema de ecuaciones diferenciales se obtiene el perfil de concentraciones del CO_2 en la zona interfacial, que al ser diferenciado y evaluado en la interfase permite calcular la transferencia del CO_2 , como se muestra en la siguiente expresión

$$E = \frac{N_1|_{z=0}}{N_1|_{z=\infty}} = - \frac{dC_1}{dz} \Big|_{z=0} \frac{\delta}{C_1^* - C_1^b} \quad (1.5)$$

Dada la no linealidad de las ecuaciones diferenciales, éstas no pueden ser resueltas analíticamente, por lo que se ha recurrido a aproximaciones^{23,28}. La alternativa a estas aproximaciones es la integración numérica de las ecuaciones diferenciales, como en el estudio realizado por Versteeg^{23,24}, donde las ecuaciones diferenciales se solucionaron numéricamente y se compararon con resultados experimentales para varios sistemas isotérmicos, entre ellos el sistema CO_2 -MEA- H_2O . Las desviaciones reportadas por Versteeg entre los datos teóricos y experimentales presentan una desviación máxima del 40 % en el porcentaje de absorción global del sistema. En este mismo estudio Versteeg, concluyo que para sistemas donde la constante de equilibrio es muy grande, se presenta una situación idéntica a la de una reacción irreversible, dado que la velocidad de la reacción inversa es muy pequeña.

Como en la reacción (1.1), la constante de equilibrio es muy grande (17493.6 mol/kmol a 298 °K) y la precisión obtenida con métodos más rigurosos no justifica el tiempo de cálculo, en el presente trabajo se utiliza la aproximación a una reacción irreversible de segundo orden, transformándose las ecuaciones (1.4) en el siguiente sistema de ecuaciones no lineales.

$$D_1 \frac{d^2 C_1}{dz^2} = \nu k_1 C_1 C_2 \quad (1.6)$$

$$D_1 \frac{d^2 C_2}{dz^2} = \nu k_1 C_1 C_2 \quad (1.7)$$

$$D_1 \frac{d^2 C_3}{dz^2} = \nu k_1 C_1 C_2 \quad (1.8)$$

$$D_1 \frac{d^2 C_4}{dz^2} = \nu k_1 C_1 C_2 \quad (1.9)$$

Como nuestro interés se encuentra en la rapidez de transferencia del CO_2 en la fase líquida, se resuelve únicamente este problema con las ecuaciones diferenciales simultáneas (1.6) y (1.7). Las siguientes condiciones límites se utilizan en la integración:

$$\text{Si } z=0 \text{ entonces } C_1 = C_1^* \text{ y } \frac{dC_2}{dz} = 0,$$

$$\text{Si } z=\delta \text{ entonces } C_1 = C_1^b \text{ y } C_2 = C_2^b$$

Combinando las ecuaciones (1.6) y (1.7), integrando dos veces y usando las condiciones l mites, se obtiene:

$$C_2(x) - C_2b = \frac{\nu_2 D_1 \left[C_1(x) - C_1b + \frac{dC_1}{dx} \Big|_{x=0} (\delta - x) \right]}{\nu_1 D_2} \quad (1.10)$$

Combinando la ecuaci n (1.5) y (1.10) y escribiendo para condiciones interfaciales, se obtiene la siguiente ecuaci n:

$$C_2^* = C_2b \left[1 + \frac{(1 - N_2)(1 - E)}{N_2} \right] \quad (1.11)$$

a partir de la cual se definen los siguientes grupos:

$$N_2 = \frac{\nu_1 D_2 C_2 b}{\nu_2 D_1 C_1^*}$$

$$N_3 = \frac{C_1 b}{C_1^*}$$

Se puede mostrar que el valor de N_1 tiene poca influencia sobre el factor de aceleraci n²⁰, por lo que normalmente se desprecia, quedando la ecuaci n (1.11) de la siguiente forma:

$$C_2^* = C_2b \left[1 + \frac{(1 - E)}{N_2} \right] \quad (1.12)$$

Al observar la ecuaci n (1.5), se puede ver que para determinar el factor de aceleraci n y de aqu  la transferencia de masa, es necesario calcular el perfil de concentraciones en la interfaz, donde se puede considerar que $C_2 = C_2^*$, transformandose la ecuaci n (1.6) en:

$$D_1 \frac{d^2 C_1}{dx^2} = \nu k_1 C_1 C_2^* \quad \text{para } z \text{ cercano a cero}$$

Integrando esta ecuaci n se obtiene la expresi n final del factor de aceleraci n:

$$E = \frac{Ha \sqrt{1 - \frac{E-1}{N_2}}}{\tanh \left[Ha \sqrt{1 - \frac{E-1}{N_2}} \right]}$$

$$Ha = \sqrt{\frac{k_1 C_2 b D_1}{k_{11}}}$$

La ecuación anterior es implícita, Kishinevskii desarrollo una ecuación explícita aproximada, que según Alper²⁰ presenta una máxima diferencia del 8 % con respecto a la ecuación implícita.

$$E = 1 + \frac{Ha \left(1 - e^{-0.65 Ha \sqrt{A}} \right)}{A}$$

$$A = \frac{Ha}{N_2} + e^{\frac{0.68}{Ha} - \frac{0.45 Ha}{N_2}}$$

Como se observa en las expresiones anteriores el cálculo del factor de aceleración requiere del conocimiento de la constante de velocidad de la reacción directa en la reacción (11) (k_1) Blauwhoff²⁴ recopiló una gran cantidad de datos sobre esta constante de velocidad de reacción, llegando a la conclusión, de que todos ellos se ajustan perfectamente a la siguiente ecuación

$$\log k_1 = 10.99 - \frac{2152}{T}, \text{ en m}^3/\text{kmol s}$$

Las expresiones anteriores son las utilizadas en el presente trabajo para determinar el factor de aceleración y a partir de este la transferencia del CO_2 en la fase líquida

1.2 Transferencia de masa en la fase gaseosa.

A diferencia de la fase líquida, la determinación de la transferencia de masa del seno de la fase gaseosa a la interfase, no presenta la dificultad de la presencia de reacciones químicas, facilitando su determinación.

Para determinar la transferencia de masa a través de la fase gaseosa en ausencia de reacciones químicas y en estado estacionario, se parte de la ley de Fick modificada

$$N_1 = -CD_1 \frac{dy_1}{dz} + y_1 \sum_{i=1}^n N_i$$

Introduciendo el siguiente parámetro:

$$t_1 = \frac{\sum_{i=1}^n N_i}{N_1}$$

la ley de Fick se transforma en:

$$N_1 = y_1 t_1 N_1 - CD_1 \frac{dy_1}{dz}$$

Como N_1 se presenta en ausencia de reacciones químicas y en estado estacionario, es constante a lo largo de la zona interfacial, por lo que se puede realizar la integración de la ley de Fick modificada con las siguientes condiciones a la frontera.

Si $z = 0$, entonces $y_1 = y_1^a$

Si $z = -\delta$, entonces $y_1 = y_1^b$

cuyo resultado es:

$$N_1 = \frac{k_g a}{t_1} \ln \left(\frac{1 - t_1 y_1^a}{1 - t_1 y_1^b} \right) \quad (1.13)$$

Para propósitos de integración a menudo es preferible trabajar con alturas de unidad de transferencia, en lugar de coeficientes de transferencia de masa, dado que las primeras pueden considerarse constantes en un amplio intervalo. La ecuación (1.13) se convierte en:

$$N_1 a = \frac{Gm}{t_1 HTU_g} \ln \left(\frac{1 - t_1 y_1^a}{1 - t_1 y_1^b} \right) \quad (1.14)$$

La ecuación (1.14) determina la cantidad de CO_2 que se transporta del seno de la fase gaseosa a la interfase gas-líquido. Como puede observarse el cálculo de N_1 requiere del conocimiento de t_1 que a su vez es función de N_1 , por lo que la relación anterior es implícita.

El término t_1 es una función de todas las especies que se transfieren de una fase a otra, por lo que también N_1 es una función de los flujos de estas especies. En el sistema de estudio, aparte del CO_2 , la única especie que se transfiere de una fase a otra es el H_2O , por lo que es necesario estimar su velocidad de transferencia. El cálculo de la velocidad de transferencia del H_2O , se realiza de una manera similar a la del CO_2 , pero se desprecia la resistencia a la transferencia del H_2O en la fase líquida, dada su alta concentración. Las ecuaciones necesarias para estimar la velocidad de transferencia del H_2O son:

$$N_1 a = \frac{Gm}{t_1 H T U_g} \ln \left(\frac{1 - t_1 y_2^*}{1 - t_1 y_2} \right)$$

$$y_2^* = \frac{P^0 x_2 b}{P}$$

$$t_1 = \frac{\sum_{i=1}^n N_i}{N_1}$$

La determinación de N_1 también requiere del conocimiento de las concentraciones interfaciales, las cuales se determinan igualando las expresiones de N_1 a ambos lados de la interfase, de la manera siguiente:

$$N_1 a = \frac{Gm}{t_1 H T U_g} \ln \left(\frac{1 - t_1 y_1^*}{1 - t_1 y_1} \right) = \frac{ELm}{H T U_l} (x_1^* - x_1 b)$$

Manipulando algebraicamente la expresión anterior se obtiene:

$$(1 - t_1 y_1 b) e^{\frac{ELm_1 H T U_g (x_1^* - x_1 b)}{Gm H T U_l}} + t_1 y_1^* - 1 = 0$$

junto con la relación de equilibrio

$$y_1^* = \frac{C_T H_{\text{CO}_2} x_1^*}{P}$$

se resuelven simultáneamente para determinar las concentraciones en equilibrio, y de aquí el flujo del CO_2 a través de la interfase gas-líquido.

1.3 Transferencia de calor interfacial.

La transferencia de masa sucede simultáneamente con la transferencia de calor debido a los intercambios energéticos que acompañan a los procesos de transferencia de masa. En tales situaciones, el calor transferido es el resultado no solo de los fenómenos de conducción y convección ocasionados por la diferencia de temperaturas que ocurren en ausencia de transferencia de masa, sino que también incluye el calor sensible transportado por las especies que se difunden.

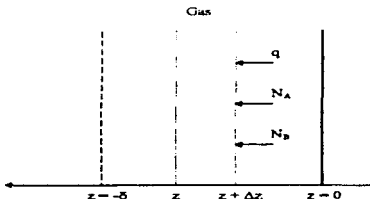


Figura 1.2 Transferencia simultánea de calor y masa.

En la figura 1.2 se representan dos sustancias A y B que fluyen a través de una fase gaseosa en condiciones que causan transferencia de masa y calor. La masa total transferida por unidad de tiempo y área de A y B es N_A y N_B respectivamente, y el calor transferido debido al fenómeno de conducción es q , expresado por unidad de tiempo y área. Realizando un balance diferencial de calor en estado estacionario entre z y $z + \Delta z$ se obtiene la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{dq}{dz} + (N_A C_{pA} + N_B C_{pB}) \frac{dT}{dz} = 0$$

Sustituyendo la ley de Fourier³³ para la transferencia de calor en la ecuación anterior se obtiene:

$$\frac{d^2 T}{dz^2} - C \frac{dT}{dz} = 0$$

donde:

$$C = \frac{N_A C_{pA} + N_B C_{pB}}{k}$$

Con las siguientes condiciones a la frontera.

$$\text{Si } z = 0 \text{ entonces } T = T_1$$

$$\text{Si } z = -\delta \text{ entonces } T = T_2$$

La integración de la ecuación diferencial anterior proporciona el perfil y gradiente de temperaturas, dados por:

$$T = T_1 + (e^{Cx} - 1)\beta$$

$$\frac{dT}{dx} = C\beta e^{Cx}$$

$$\beta = \frac{T_2 - T_1}{e^{-C\delta} - 1}$$

La determinación de la transferencia de calor total a través de la interfase, se realiza evaluando el gradiente de temperaturas en dicha interfase y sustituyéndolo en la ecuación para la transferencia de calor de Fourier de la siguiente forma.

$$q(x) = -k \frac{dT}{dx} = -kC\beta e^{Cx}$$

$$q(0) = h_a T_f(T_2 - T_1)$$

$$T_f = \frac{C_0}{1 - e^{-C\delta}}$$

$$C_0 = \frac{N_A C_{pA} + N_B C_{pB}}{h_a}$$

donde:

$$h_a = k/\delta$$

El factor Ackermann (T_f), es un factor de corrección del coeficiente de la transferencia de calor, debido a la transferencia de masa. Si la transferencia de masa se realiza en el mismo sentido que la transferencia de calor, el factor Ackermann es mayor de la unidad, y será menor que la unidad si la transferencia de masa y calor se realizan en sentidos opuestos.

Como puede observarse en las expresiones anteriores, el cálculo del flujo de calor a través de la interfase requiere del conocimiento de la temperatura interfacial. Puesto que el calor transfiriendo de una fase a la otra es el mismo, la temperatura interfacial se determina, igualando el flujo de calor a ambos lados de la interfase de la siguiente manera.

$$q = h_g T_f (T_g - T_i) = h_l (T_i - T_l)$$

En la ecuación anterior la única incógnita es la temperatura interfacial, cuyo despeje da origen a la siguiente ecuación.

$$T_i = \frac{T_l h_l + T_g h_g T_f}{h_l + h_g T_f}$$

La ecuación anterior permite el cálculo de la temperatura interfacial, necesaria para determinar el flujo de calor a través de la interface gas-liquido.

El calor total disipado en la interface q_T , incluirá, adicionalmente, el efecto producido cuando la masa pasa a través de la interface, calculándose como muestra la siguiente ecuación

$$q_T = q + \Delta H_{v_A} N_A + \Delta H_{v_B} N_B$$

Para el sistema de interés en el presente trabajo, al CO_2 se identifica con la sustancia A y el H_2O con la sustancia B

CAPITULO 2

SOLUBILIDAD Y CALOR DE SOLUCIÓN.

2.1 Equilibrio físico-químico (CO₂ - MEA - H₂O).

Uno de los aspectos más importantes en el diseño de los sistemas de absorción, es la solubilidad de los compuestos gaseosos de interés en el solvente utilizado. Está solubilidad determina la cantidad de líquido necesaria para una recuperación total o económica del soluto.

La determinación de la solubilidad del CO₂ en soluciones acuosas de MEA presenta la dificultad adicional de la existencia de reacciones químicas reversibles en el seno de la fase líquida. Las reacciones químicas reversibles son las siguientes:



Como puede observarse, en las reacciones químicas anteriores, están presentes dos cationes (HOC₂H₄NH₃⁺ y H⁺), cuatro aniones (HOC₂H₄NCHOO⁻, HCO₃⁻, OH⁻ y CO₃²⁻) y tres especies neutrales de naturaleza polar (HOC₂H₄NH₂, H₂O, y CO₂), por lo que las soluciones que se forman presentan desviaciones considerables del comportamiento ideal.

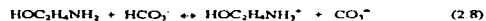
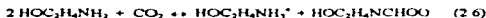
Existen en general tres métodos para predecir la solubilidad de este sistema no ideal, dos de ellos implican el manejo de coeficientes de actividad para soluciones electrolíticas con las ecuaciones de Margules o NRTL., el tercero, consiste únicamente en el ajuste de las constantes de equilibrio de las reacciones químicas a polímeros. Los dos primeros son más precisos en un rango más amplio de temperaturas y concentraciones, aunque involucran cálculos mucho más complejos. El tercero solamente es preciso en un intervalo limitado de temperaturas y concentraciones, pero es matemáticamente más sencillo. En el presente trabajo se utiliza este último, dado que es preciso en el rango de temperaturas y concentraciones de interés. En la tabla 2.1 se enlistan los valores de las constantes de equilibrio como función de la temperatura de las reacciones (2.1) a (2.5) proporcionadas por Kent.¹⁸

Tabla 2.1 Constantes de equilibrio para las reacciones (2.1) a (2.5)

$$K_i = \exp [A + B/T + C/T^2 + D/T^3 + E/T^4] \text{ para } T \text{ en } ^\circ\text{K}$$

Ki	Unidades	A	B x 10 ⁻¹	C x 10 ⁻⁴	D x 10 ⁻³	E x 10 ⁻¹²
1	kmol / m ³	-3.3636	-5.8511111	0	0	0
2	kmol / m ³	6.69425	-3.090428	0	0	0
3	kmol / m ³	-241.818	298.252778	-148.527778	33.264746	-2.823931
4	kmol ² / m ⁶	39.5554	-98.79	56.882716	-14.645062	1.361454
5	kmol / m ³	-294.74	364.385	-184.157407	41.579218	-3.542905

Una vez que se conocen las constantes de equilibrio a una determinada temperatura, el conocimiento de la solubilidad del CO₂ requiere del cálculo de las concentraciones de todas las especies químicas involucradas, para lo cual, primero se replantean las reacciones químicas (2.1) a (2.5) de la manera siguiente:



Las constantes de equilibrio como función de la temperatura para las reacciones (2.6) a (2.9) se enlistan en la tabla 2.2 y en términos de concentraciones se muestran a continuación:

$$K_6 = C_4 C_7 / C_2^2 C_1 \quad (2.10)$$

$$K_7 = C_4 C_7 / C_1 C_2 \quad (2.11)$$

$$K_8 = C_7 C_3 / C_2 C_6 \quad (2.12)$$

$$K_9 = C_7 C_3 / C_2 \quad (2.13)$$

Tabla 2.2 Constantes de equilibrio para las reacciones (2.6) a (2.9) y la constante de Henry

$$K_i \text{ o } H_{\text{CO}_2} = \exp [A + B/T + C/T^2 + D/T^3 + E/T^4] \text{ para } T \text{ en } ^\circ\text{K}$$

Ki	Unidades	A	B x 10 ⁻¹	C x 10 ⁻⁴	D x 10 ⁻³	E x 10 ⁻¹²	Ki de Kent
6	m ³ / kmol	-245.14865	307.194717	-148.527778	33.264746	-2.823931	K ₆ /K ₂
7	-----	-238.4544	304.103889	-148.527778	33.264746	-2.823931	K ₇ /K ₁
8	-----	-291.3764	370.236111	-184.157407	41.579218	-3.542905	K ₈ /K ₁
9	kmol / m ³	42.919	-92.938889	56.882716	-14.645062	1.361454	K ₉ /K ₁
H _{CO2}	Torr m ³ /kmol	22.2819	-13.830611	6.913457	-1.558951	0.120037	H _{CO2}

El cálculo de las concentraciones de todas las especies químicas involucradas significa, matemáticamente, encontrar el valor de siete incógnitas (una por cada especie química en solución, excepto el agua que se considera constante), y sólo se cuenta hasta este punto con cuatro ecuaciones (constantes de equilibrio (2.10) a (2.13)), las ecuaciones faltantes se obtienen realizando balances de masa totales para la MEA, el carbono, y un balance de electroneutralidad. Este sistema de ecuaciones no lineales puede resolverse por el método de Newton, pero como señala Rinker¹¹, el método de Newton no converge para este sistema de ecuaciones a menos que la selección inicial de las concentraciones, este muy cercana al valor real. La ventaja de las reacciones (2.6) a (2.9) sobre las reacciones (2.1) a (2.5) radica, en que se pueden escribir las concentraciones de todas las especies químicas en términos de la conversión de la MEA (X_1), reduciendo el número de ecuaciones de siete a cuatro facilitando su resolución. Las concentraciones de las especies químicas en términos de la conversión de MEA son las siguientes:

$$\begin{aligned}C_2 &= C_2^0 (1 - X_1 - X_2 - X_3 - X_4) \\C_1 &= C_2^0 (Y_1 - X_1 / 2 - X_2) \\C_3 &= C_2^0 (X_1 / 2 + X_2 + X_3 + X_4) \\C_4 &= C_2^0 X_1 / 2 \\C_5 &= C_2^0 (Y_3 - X_2 - X_4) \\C_6 &= C_2^0 (X_2 - X_3) \\C_7 &= C_2^0 X_3 \\C_8 &= C_2^0 X_4\end{aligned}$$

La sustitución de las ecuaciones anteriores en las constantes de equilibrio (2.10) a (2.13) dan como resultado el siguiente sistema de ecuaciones no lineales.

$$2 C_2^0 K_4 (Y_1 - X_1 / 2 - X_2) (1 - X_1 - X_2 - X_3 - X_4)^2 - X_1 (X_1 / 2 + X_2 + X_3 + X_4) = 0 \quad (2.14)$$

$$K_1 (Y_1 - X_1 / 2 - X_2) (1 - X_1 - X_2 - X_3 - X_4) - (X_1 / 2 + X_2 + X_3 + X_4) (X_2 - X_3) = 0 \quad (2.15)$$

$$K_4 (1 - X_1 - X_2 - X_3 - X_4) (X_2 - X_3) - X_1 (X_1 / 2 + X_2 + X_3 + X_4) = 0 \quad (2.16)$$

$$K_9 (1 - X_1 - X_2 - X_3 - X_4) - C_2^0 X_4 (X_1 / 2 + X_2 + X_3 + X_4) = 0 \quad (2.17)$$

Este es el sistema de ecuaciones que se resuelve con el método de Newton para determinar las conversiones en equilibrio de la MEA y las concentraciones de todas las especies químicas involucradas. La presión parcial del CO₂ en equilibrio con el CO₂ sin reaccionar, se calcula utilizando la constante de la ley de Henry proporcionada por Kent. En las tablas 2.3 y 2.4 se muestra la comparación entre los valores calculados utilizando las relaciones anteriores y los datos experimentales reportados en la literatura. En el simulador elaborado en el presente trabajo se incluye un subrutina para calcular el equilibrio físico-químico del sistema CO₂-MEA-H₂O.

Tabla 2.3 Solubilidad del CO₂ en 15.65 % de MEA

313°K	P _{CO₂} , kPa		353°K	P _{CO₂} , kPa	
	Reportado ¹⁷	Calculado		Reportado ¹⁷	Calculado
0.3525	0.7934	0.1005	0.2665	1.01	1.03
0.417	0.298	0.34	0.404	7.04	7.87
0.501	2.48	2.56	0.5915	155.6	145.6
0.687	92.6	90.7	0.62	228.7	210.6

Y₁ = kmoles de CO₂ inuales/kmole de MEA inuales

Tabla 2.4 Solubilidad del CO₂ en 15.3% de MEA

313°K	P _{CO₂} , kPa		333°K	P _{CO₂} , kPa	
	Reportado ¹⁴	Calculado		Reportado ¹⁴	Calculado
0.2	8.273E-3	8.858E-3	0.1	9.309E-3	9.219E-3
0.4	0.2413	0.2405	0.3	0.3068	0.2926
0.6	23.994	23.951	0.6	66.672	62.048

Y₁ = kmoles de CO₂ inuales/kmole de MEA inuales

2.2 Calor de solución.

El calor de solución del CO₂ en soluciones acuosas de MEA, se debe principalmente al calor liberado en las siguientes reacciones químicas en fase líquida.



Donde el calor de reacción está dado por el ΔH_R de la reacción, que se calcula de la siguiente forma.

$$\Delta H_R^T = \sum_{p=1}^m H_p^T - \sum_{r=1}^n H_r^T \quad (2.2)$$

Como puede observarse en la ecuación anterior, el cálculo del ΔH_R sólo requiere del conocimiento de los calores de formación de los productos y reactivos en fase líquida a la temperatura de reacción, pero normalmente no se dispone de los calores de formación en fase líquida a cualquier temperatura, sino en fase gaseosa. Como la entalpía es una función de estado, puede utilizarse cualquier secuencia de estados (

trayectoria) para determinar estos calores de formación en fase líquida. La trayectoria a seguir se describe a continuación.

Primero se determinan los calores de formación de reactivos y productos en fase gaseosa a la temperatura de reacción con las correlaciones proporcionadas por Mommesan³³ que se muestra en la tabla 2.5

Tabla 2.5 Entalpías de formación en fase gaseosa

$H_f^* = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4$, para T en °K y H_f^* en cal/gmol.

Componente	a	b	$c \times 10^3$	$d \times 10^6$	$e \times 10^8$
1	-96130	4.728	8.77	-4.46	1.024
2	-51670	2.224	35.94	-14.47	2.78
3, 4	-229500	20.26	61.4	-14	-1.3
5	-60135.8	7.701	0.22975	0.84033	-0.21475
3, 6	-229500	20.26	61.4	-14	-1.3

Una vez determinados los calores de formación en fase gaseosa, se calculan los calores latentes de vaporización a la temperatura de reacción para cada uno de los compuestos con la siguiente ecuación.

$$\Delta H_{v,2} = \Delta H_{v,1} \left(\frac{1 - T_2/T_c}{1 - T_1/T_c} \right)^{0.38}$$

Los valores de los parámetros de la ecuación anterior se muestran en la tabla 2.6.

Tabla 2.6 Calores latentes de vaporización³³

Componente	ΔH_v , cal/gmol a T_b	T_b , °K	T_c , °K
1	4100	194.7	304.3
2	12000	443.5	614
3, 4	17000	350	420
5	9717	373.2	647.3
3, 6	15000	350	420

Por último, el calor de formación en fase líquida está dado por:

$$H_f^l = H_f^* - \Delta H_v$$

Una vez determinados los calores de formación en fase líquida de los productos y reactivos, el cálculo del ΔH_R se resume a sustituir estos valores de formación en la ecuación (2.20), dando como resultado las siguientes expresiones

$$\Delta H_{R,1} = H_{3,s}^1 - (H_1^1 + 2 H_2^1)$$

$$\Delta H_{R,2} = H_{3,s}^1 - (H_2^1 + H_1^1 + H_3^1)$$

Estos calores de reacción están expresados por un mol de CO_2 reaccionado, para determinar el calor de reacción real, solamente es necesario multiplicar por el número real de moles del CO_2 que reacciona, quedando la expresión final para el calor de reacción (solución) por mol total de solución de la siguiente forma:

$$\Delta H_R = \frac{C_3 \Delta H_{R,1} + (C_4 + C_7) \Delta H_{R,2}}{C_T}$$

CAPITULO 3

MÉTODO DE CALCULO.

3.1 Absorción en la columna empacada.

Para determinar teóricamente la absorción del CO_2 en soluciones acuosas de MEA, primero es necesario dividir el lecho empacado en un número de secciones de altura ΔX , donde las propiedades físicas en cada uno de estos segmentos se consideren constantes; el j -ésimo segmento se muestra en la figura 3.1.

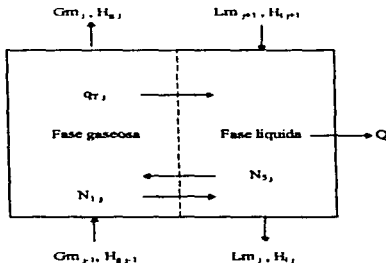


Figura 3.1 Esquema de la j -ésima sección en la columna empacada.

A partir de la cual se obtienen los siguientes balances de masa y energía.

Balances de masa para la fase líquida

$$Lm_j = Lm_{j-1} + (N_1 + N_2) \Delta X \quad (3.1)$$

$$x_{1,j} = (Lm_{j-1} x_{1,j-1} + N_1 \Delta X) / Lm_j \quad (3.2)$$

$$x_{2,j} = (Lm_{j-1} x_{2,j-1} + N_2 \Delta X) / Lm_j \quad (3.3)$$

$$x_{2,j} = Lm_{j-1} x_{2,j-1} / Lm_j \quad (3.4)$$

Balances de masa para la fase gaseosa.

$$Gm_j = Gm_{j-1} - (N_1 + N_2) \Delta X \quad (3.5)$$

$$y_{1,i} = (Gm_{p,i} y_{1,p,i} - N_1 \Delta X) / Gm_i \quad (3.6)$$

$$y_{2,i} = (Gm_{p,i} y_{2,p,i} - N_2 \Delta X) / Gm_i \quad (3.7)$$

$$y_{s,i} = Gm_{p,i} y_{s,p,i} / Gm_i \quad (3.8)$$

Balance de energía para la fase líquida.

$$H_{l,i} = (H_{l,p,i} Lm_{p,i} - \Delta H_R + (q_{T,i} - 4 Q / D) \Delta X) Lm_i \quad (3.9)$$

Balance de energía para la fase gaseosa.

$$H_{g,i} = (H_{g,p,i} Gm_{p,i} - q_{T,i} \Delta X) / Gm_i \quad (3.10)$$

La exactitud de los cálculos se incrementa con el número de segmentos, pero el tiempo de cálculo necesario para la simulación también se incrementa. Stockar⁴³ al realizar la simulación de columnas industriales, encontró que el número necesario de segmentos nunca es mayor a 100. Para establecer el número de segmentos necesarios para el sistema de interés, se realizaron pruebas de simulación en computadora, y se encontró que 50 segmentos son suficientes para calcular la absorción del CO₂ en soluciones acuosas de MEA, dado que un número mayor de segmentos no mejoran substancialmente la precisión obtenida y si incrementan considerablemente el tiempo de cálculo.

En la figura 3.2 se describe el algoritmo de cálculo para la simulación de la absorción del CO₂ en soluciones acuosas de MEA en la columna empacada. Este algoritmo está basado en algoritmo de Stockar y Wilke⁴³.

Los cálculos inician asignando a las propiedades físicas y químicas del líquido en todos los segmentos, los valores correspondientes a los del líquido de alimentación.

Comenzando con el conocimiento de las propiedades del gas de alimentación en el fondo de la torre y trabajando hacia arriba, las propiedades del gas en cada segmento se calculan por medio de las ecuaciones (3.5) a la (3.8) y la (3.10).

El uso de las ecuaciones de balance de masa y energía para el gas requiere del conocimiento de N₁ y q_T, para los cuales las composiciones y la temperatura interfacial deben conocerse. Estas se evalúan primero en base del conocimiento de las propiedades físicas y químicas previamente asignadas a la fase líquida y gaseosa en cada segmento.

Una vez determinadas las propiedades del gas, se procede al cálculo de las nuevas composiciones y las entalpías molares de la fase líquida en todos los segmentos, comenzando en la parte superior de la columna con las ecuaciones (3.1) a la (3.4) y la (3.9), despreciando en todas ellas la retención del líquido en cada segmento.

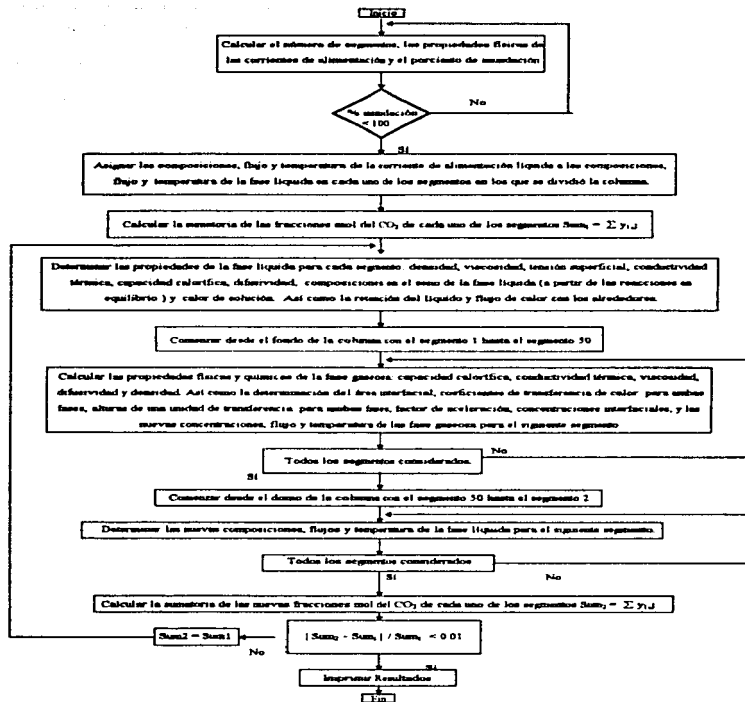


Figura 3.2 Diagrama de flujo para calcular la absorción en columnas empacadas

Los cálculos terminan en el momento en que el porcentaje de desviación de las concentraciones del CO_2 , entre una corrida y la anterior es menor al 1%.

3.2 Temperaturas de la fase líquida y gaseosa.

La determinación de las entalpías molares del líquido y el gas en cada segmento, inicialmente requiere del conocimiento de las entalpías de las corrientes de alimentación; éstas se calculan en base a las siguientes relaciones.

$$H_l = C_{p_l}(T_l - T_o)$$

$$H_g = C_{p_g}(T_g - T_o) + \sum_{i=1}^n y_i \Delta H_{v_i}$$

Donde T_o es la temperatura de referencia (283.15 °K) a la cual sólo el agua contribuye al calor latente de la entalpía molar de la fase gaseosa. Las expresiones anteriores son válidas no sólo para las corrientes de alimentación, sino también para las entalpías molares en todos los segmentos, por lo que estas expresiones junto con los balances de energía permiten calcular las temperaturas de las fases líquida y gaseosa, con las siguientes expresiones

$$T_l = T_o + \frac{H_l}{C_{p_l}} \quad (3.13)$$

$$T_g = \frac{H_g - \sum y_{H_2O} \Delta H_{v_{H_2O}}}{C_{p_g}} + T_o \quad (3.14)$$

Todas las expresiones anteriores desprecian las desviaciones del comportamiento ideal de las propiedades que pueden presentar las mezclas líquidas y gaseosas.

CAPITULO 4

EQUIPO Y PROCEDIMIENTO.

4.1 Equipo.

En la figura 4.1 se muestra un diagrama simplificado de la columna empacada y su equipo auxiliar donde se llevo a cabo la absorción experimental del CO_2 en las soluciones acuosas de MEA.

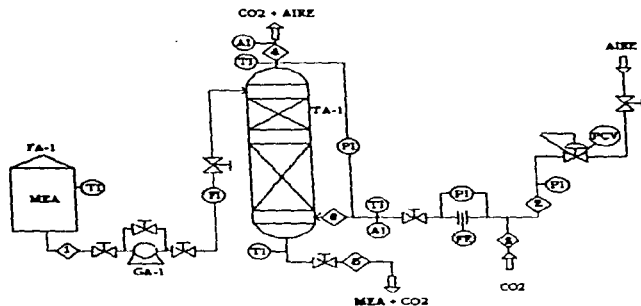


Figura 4.1 Diagrama de la columna empacada y su equipo auxiliar.

La columna de vidrio Pyrex mostrada en la figura 4.1 se encuentra instalada en el laboratorio de Ingeniería Química de la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México. La columna mide 7.8 cm de diámetro interno y 8.8 cm de diámetro externo. Esta columna tiene un lecho empacado al azar con anillos Raschig de 1.45 cm de altura y una porosidad de 0.63. Los anillos Raschig son de cerámica de diámetro nominal de $\frac{1}{8}$ pulgada, con un espesor de pared de 0.3 cm, y una altura y diámetro mayor de 1.3 cm promedio.

La columna está equipada con una placa de orificio para determinar el flujo de gas de alimentación en la corriente 6, y con un rotámetro para determinar el flujo del líquido de alimentación en la corriente 1. Las características físicas y las correlaciones para determinar los flujos a través del rotámetro y de la placa de orificio se encuentran en el apéndice A.

Los indicadores de temperatura de la columna consisten en termómetros de mercurio de laboratorio, y los indicadores de presión de la columna y de la placa de orificio son tubos en "U" con agua como fluido manométrico.

4.2 Procedimiento.

Los experimentos se establecieron en base a una práctica de laboratorio propuesta en el laboratorio de Ingeniería Química de la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México para el laboratorio de Procesos de Separación I. En esta práctica se desprecian los efectos de transferencia y generación de calor del sistema, así como el efecto que tienen las reacciones químicas reversibles sobre el equilibrio físico-químico y la transferencia de masa, por lo que de esta práctica únicamente se toma el desarrollo experimental como base para los experimentos desarrollados en el presente trabajo.

Los experimentos realizados en el laboratorio comenzaron con la preparación de soluciones acuosas de MEA de concentración comprendida entre 10 y 20% peso en el tanque de almacenamiento FA-1. Después el suministro de aire se fijó estableciendo una caída de presión en la placa de orificio entre 2 y 4 cmH_2O y asegurando una presión manométrica de 1 kg/cm^2 en la corriente número 2 por medio de la válvula reguladora de presión. Ya establecido el flujo del aire a la columna, se alimentó el CO_2 a la corriente número 2 vía la corriente número 3 para formar la corriente de alimentación a la columna (corriente 6); de tal forma que la composición del CO_2 en la corriente se encontrara entre el 5 y 40% volumen. Una vez fijado el flujo de la corriente de alimentación de la fase gaseosa y su concentración, se procedió al registro de su temperatura. Después de establecer las condiciones de alimentación del gas, se procedió a establecer las condiciones de alimentación de la solución acuosa de MEA de alimentación (corriente 1), esto se realizó fijando la lectura del rotámetro entre las posiciones 1 y 3, y registrando la temperatura en dicha corriente.

El estado estacionario se asumió cuando la temperatura de la corriente gaseosa de salida (corriente 4), permaneció constante. Este estado estacionario depende de los flujos de alimentación, pero en general nunca sobrepasa a la 1: hora. Ya establecido el estado estacionario en la columna de absorción, se procedió al registro de la caída de presión en el lecho empacado, a la toma de muestras del gas y del líquido de salida (corrientes 4 y 5 respectivamente), y a la lectura de temperaturas en las mismas corrientes de salida.

La concentración de CO_2 en las corrientes gaseosas de alimentación y de salida (corrientes 6 y 4), se determinó con un analizador de gases Orsat y la concentración de la MEA en las soluciones acuosas de alimentación y salida se determinó con una titulación de HCl 1M y fenolftaleína como indicador. La curva de titulación a 25°C se muestra en la figura 4.2.

Las corridas experimentales se dividieron en tres grupos, todos en base a los intercambios de calor de la columna con los alrededores. En el primer grupo, se permitió el libre intercambio de calor con los alrededores (corridos no adiabáticos), en el segundo, la columna fue provista de un aislamiento externo de fibra de vidrio (corridos adiabáticos), y por último, en el tercer grupo, el intercambio de calor con los alrededores fue manipulado con agua de enfriamiento a la temperatura ambiente y agua de calentamiento a

unos 20 °K por arriba de la temperatura del líquido de alimentación (corridas no adiabáticas con serpentín). El agua se hizo circular a través de un serpentín de PVC montado alrededor de la columna en forma provisional.

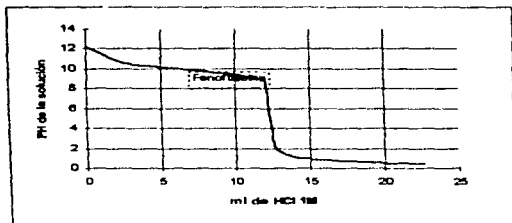


Figura 4.2 Curva de titulación para 5ml de una solución acuosa de MEA 15.3 % a 298.15°K con HCl 1M

Una vez realizados los experimentos, se procedió a la comparación entre los resultados obtenidos en forma experimental y los calculados en forma teórica con el simulador de computadora elaborado en el lenguaje de programación FORTRAN 77 Lahey. La comparación se realizó tanto con la aproximación isotérmica, como con el modelo no isotérmico. Con el simulador, también se estableció teóricamente si las simplificaciones usuales en el diseño de columnas de absorción son correctas en el sistema de interés. Por último, se comparó el grado de absorción obtenido en los experimentos no adiabáticos con el obtenido en los experimentos adiabáticos con la finalidad de establecer las condiciones de operación en las cuales el incremento de temperatura del sistema afecta el grado de absorción del CO₂ en soluciones acuosas de MEA.

CAPITULO 5

ANÁLISIS DE RESULTADOS

5.1 Perfiles teóricos de concentración y temperatura.

La figura 5.1 muestra los perfiles de temperatura teóricos, calculados con el simulador a 289.15°K como temperatura de alimentación, con una concentración de CO₂ en la corriente gaseosa 0.114, una fracción peso de 0.1608 de MEA en el líquido de alimentación y una relación de 1.2 entre el flujo del líquido y el gas.

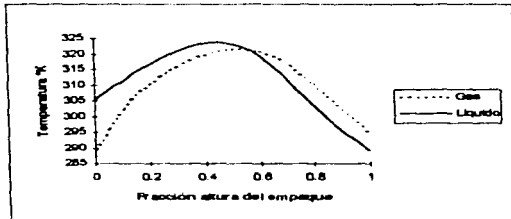


Figura 5.1 Perfiles de temperatura teóricos en condiciones no isotérmicas.

Los perfiles de temperatura mostrados en la figura 5.1 son típicos a los que se presentan en una columna de absorción industrial⁵. Los máximos de las corrientes en la columna ocurren en principio por el alto calor de solución que se genera al entrar la corriente líquida por la parte superior de la columna. En la parte baja de la columna, sin embargo, el calor generado en la absorción es más pequeño que el calor de evaporación del solvente (agua) y la transferencia de calor de la corriente líquida a la corriente gaseosa "fría" que entra a la columna, así el efecto global en la parte baja de la columna es un calentamiento de la corriente gaseosa y un enfriamiento de la corriente líquida. Como es obvio de la figura 5.1 la situación se invierte a medida que se asciende por la columna, donde ahora la transferencia de calor es de la corriente gaseosa a la corriente líquida y el agua comienza a condensarse (figura 5.2), por lo tanto el efecto en la parte superior de la columna es el calentamiento de la corriente líquida entrante y un enfriamiento de la corriente gaseosa de salida.

Cabe hacer mención que los perfiles de concentración y temperatura mostrados anteriormente, aunque son típicos en los procesos de absorción, los perfiles exactos dependen de las condiciones particulares

de alimentación del problema dado, no presentándose en algunos casos máximos, sobre todo en la fase líquida, donde los efectos opuestos a la generación de calor durante la absorción pueden nunca llegar a ser mayores a éste.

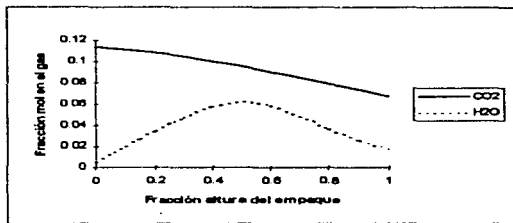


Figura 5.2 Perfiles de concentración teóricos del CO₂ y el H₂O en el gas.

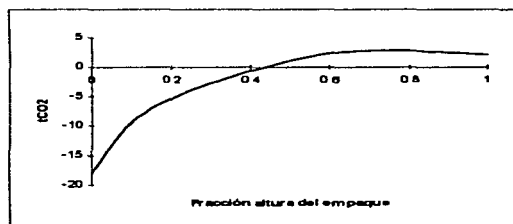


Figura 5.3 Contradifusión teórica a lo largo de la columna, $iCO_2 = \frac{NCO_2 + NH_2O}{NCO_1}$

En las figuras 5.2 y 5.3 se muestran los efectos de la evaporación y condensación del agua. Como puede observarse, este proceso no sólo afecta las concentraciones en la fase gaseosa, sino también a la difusión del dióxido de carbono. El grado de contradifusión varía ampliamente a lo largo de la columna, como lo ilustra la figura 5.3, tomando valores muy negativos en la parte baja de la columna, donde la evaporación

del agua es grande, y aumentado su valor a media que se asciende a través de la columna, hasta tomar valores positivos en la parte superior de la columna, donde parte del agua de la corriente gaseosa se condensa.

Por todo lo anterior queda claro que las simplificaciones usuales en el diseño de las columna de absorción, como son condiciones isotérmicas, contradifusión equimolar ($U_{CO_2} = 0$) y difusión unidireccional a través de una película estancada ($U_{CO_2} = 1$) sólo se cumplen en pequeñas secciones de la columna

5.2 Comparación entre el porcentaje de absorción experimental y el determinado con el modelo no isotérmico y la aproximación isotérmica.

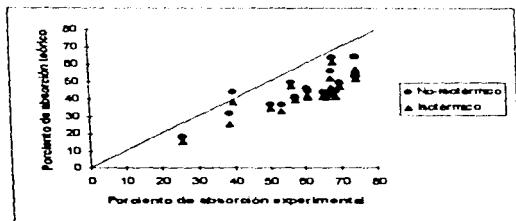


Figura 5.4 Comparación entre el porcentaje de absorción experimental y el calculado con el modelo no isotérmico y la aproximación isotérmica, para las corridas no adiabáticas.

En la figura 5.4 se presenta la comparación entre el porcentaje de absorción experimental y el obtenido teóricamente con un modelo no isotérmico y con la aproximación isotérmica, para las corridas experimentales no adiabáticas. Como puede observarse el porcentaje de absorción experimental es mayor al obtenido teóricamente para ambos modelos, lo que significa que la velocidad de transferencia del CO_2 teórica es menor que la real, este mismo resultado fue encontrado por Versteeg²¹, con una desviación máxima del 40%, valor similar a el encontrado en el presente trabajo con una desviación máxima de 37.3 % entre los valores experimentales y los calculados de forma no isotérmica, y de 41.7 % para los valores experimentales y los calculados con la aproximación isotérmica. Versteeg y sus colaboradores atribuyen las diferencias entre los valores experimentales y calculados, a la incertidumbre en el cálculo de las propiedades físicas, sobre todo a la estimación del coeficiente de difusión, que consideran, puede ser considerablemente afectado por la alta concentración de productos iónicos cerca de la interface. Otra fuente de error que consideran estos autores, es la exactitud del método experimental utilizado. Entre las anteriores causas, en el presente trabajo se considera que la influencia de la especies iónicas presentes sobre las propiedades físicas es la que tiene mayor

importancia, dado que en el presente trabajo se cuenta con valores muy precisos de las propiedades físicas del sistema, pero en ninguna de ellas se consideran los efectos de las reacciones químicas. Otras fuentes de error importantes son las simplificaciones consideradas en el cálculo del factor de aceleración, y las limitaciones teóricas postuladas en la teoría de la película.

En conclusión, el porcentaje de absorción para las corridas experimentales no adiabáticas, puede predecirse con una desviación promedio de 24.2 % por debajo del valor real, con un modelo no isotérmico. En el caso de la aproximación isotérmica, esta predice el porcentaje de absorción con una desviación promedio de 29.4 % por debajo del valor real. El error que se comete al calcular el porcentaje de absorción con la aproximación isotérmica, en lugar del modelo no isotérmico, en promedio, es de 8.7%.

Como puede observarse en la figura 5.4 y en las desviaciones promedio mencionadas anteriormente, el modelo que contempla todos los efectos de transferencia y generación de calor (el modelo no isotérmico), predice mejor la absorción del bióxido de carbono en soluciones acuosas de MEA, sino se esperaba, pero, también se observa que la aproximación isotérmica predice un porcentaje de absorción menor que el modelo no isotérmico, a pesar que los incrementos de temperatura que predice el modelo no isotérmico, provocan una menor solubilidad del CO_2 en la fase líquida, que la que se predice con el modelo isotérmico, consecuentemente a esta menor solubilidad en los cálculos no-isotérmicos, debería esperarse un menor grado de absorción calculado con el modelo no isotérmico, que el calculado con la aproximación isotérmica, lo que no sucede en este caso.

Para explicar por qué el grado de absorción calculado con la aproximación isotérmica es menor que el calculado con el modelo no isotérmico, es necesario considerar, no solo los efectos que tienen los incrementos de temperatura calculados con el modelo no isotérmico en la solubilidad del CO_2 , sino también, en como afectan a la velocidad con la cual CO_2 se transporta dentro de la fase líquida. En primer lugar al aumentar la temperatura en la fase líquida, la concentración del CO_2 en el seno de la fase líquida ($x_{\text{CO}_2,b}$) aumenta, debido a que las reacciones químicas reversibles se ven favorecidas en la dirección endotérmica (formación de CO_2). Asimismo, la solubilidad del CO_2 en la interface ($x_{\text{CO}_2}^*$) disminuye con el incremento de la temperatura, el resultado global de estos dos fenómenos es la disminución de la diferencia de concentraciones (fuerza impulsora) y consecuentemente, también disminuye la velocidad de transferencia del CO_2 . La consecuencia global de la disminución de la velocidad de transferencia del CO_2 en el sistema es disminuir el porcentaje de absorción. Al contrario de lo que sucede con la diferencia de concentraciones, aumenta la concentración de la monoetanolamina al verse favorecida la reacción endotérmica, y se incrementa la constante de velocidad de reacción con la temperatura, estos dos efectos provocan un aumento en la velocidad de reacción del CO_2 , que se manifiesta en un incremento del factor de aceleración y consecuentemente en el coeficiente de transferencia de masa. La consecuencia global del aumento del coeficiente de transferencia de masa es el incremento de la velocidad de transferencia del CO_2 en el sistema y el incremento del porcentaje de absorción.

Como resultado de los efectos anteriormente descritos, la velocidad de transferencia del CO_2 en la fase líquida experimenta un incremento en el coeficiente de transferencia de masa ($E \text{ Lm}^2/\text{HTU}$) y una

disminución en la fuerza impulsora ($K_{CO_2}^* - K_{CO_2}b$). La magnitud del aumento en el coeficiente de transferencia de masa y la magnitud de la disminución de la fuerza impulsora, son los que determinan el grado de absorción del CO_2 en el sistema.

Como se ha mencionado anteriormente, el porcentaje de absorción calculado con el modelo no isotérmico es mayor que el calculado con la aproximación isotérmica, por lo que la velocidad de transferencia del CO_2 se incrementa con los aumentos de la temperatura en la fase líquida predichos con el modelo no isotérmico, lo que significa que teóricamente, el aumento del coeficiente de transferencia de masa es más significativo que la disminución de la fuerza impulsora para la velocidad de transferencia teórica del CO_2 en el sistema de absorción, bajo las condiciones de operación establecidas en las corridas experimentales no adiabáticas.

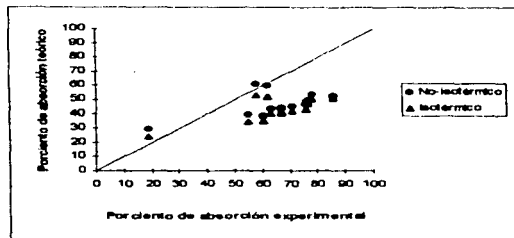


Figura 5.5 Comparación entre el porcentaje de absorción experimental y el calculado con el modelo no isotérmico y la aproximación isotérmica, para las corridas adiabáticas

En la figura 5.5 se presenta la comparación entre el porcentaje de absorción experimental y el obtenido teóricamente con un modelo no isotérmico y con la aproximación isotérmica, para las corridas experimentales adiabáticas. Como puede observarse en la figura 5.5, nuevamente el porcentaje de absorción experimental es mayor que el calculado con ambos modelos teóricos, con una desviación promedio de 30.6 % entre el porcentaje de absorción experimental y el calculado con el modelo no isotérmico, y una desviación promedio de 34.1 % entre el porcentaje de absorción experimental y el calculado con la aproximación isotérmica. El error que se comete al estimar el porcentaje de absorción con la aproximación isotérmica, en lugar del modelo no isotérmico, es en promedio de 9.2 %. Los desviaciones promedio anteriores, en general, siguen las mismas

tendencias que las descritas para las corridas no adiabáticas, por lo que la discusión sobre estas tendencias es la misma en ambos casos.

En las figuras 5.6 y 5.7 se muestra la comparación entre las temperaturas de la fase líquida en la corriente de salida determinadas experimentales y las calculas de forma teórica, para las corridas no adiabáticas y las corridas adiabáticas, respectivamente.

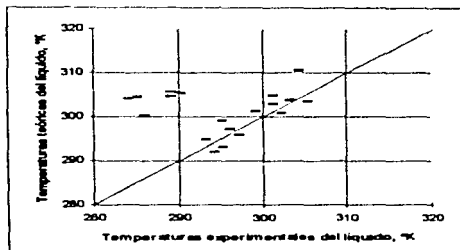


Figura 5.6 Comparación entre las temperaturas experimentales de las corrientes de salida del líquido y las calculadas teóricamente con el modelo no isotérmico, para las corridas no adiabáticas.

Como se observa en las figuras 5.6 y 5.7 las temperaturas experimentales en las corrientes líquidas de salida concuerdan bien con las determinadas en forma teórica, para ambos grupos de experimentos, a pesar de que teóricamente se absorbe menos CO_2 . Consecuentemente a esta menor absorción, debería generarse menos calor durante la absorción en forma teórica que experimentalmente, y por lo tanto el calentamiento de la fase líquida calculado teóricamente debería ser menor al medido en forma experimental. Esta discrepancia se debe a la incertidumbre que se tiene cuando se estima la transferencia de calor con los alrededores, pues se desconoce con exactitud las propiedades del material de la columna. También las irregularidades geométricas de la columna en las bridas y uniones ocasiona que la transferencia de calor real sea mayor a la estimada teóricamente, por lo que a pesar de que el calor de solución teórico es menor al real, las pérdidas de calor con los alrededores y posiblemente también con la fase gaseosa son también mas pequeñas, en conclusión, aunque hay una menor generación de calor debido a la absorción, también hay una menor transferencia de calor del líquido con el medio y la fase gaseosa.

Cabe hacer la observación en las figuras 5.6 y 5.7 que hay un grupo de temperaturas, donde las temperaturas calculadas son mucho mayores a las determinadas en forma experimental, quedando totalmente

fuera de la tendencia del resto de los datos. Estos datos tiene la peculiaridad de que corresponden, sin excepción a lecturas del rotámetro igual a 1 (los flujos más bajos), este comportamiento se debe a efectos terminales del lecho empacado. Cuando el líquido sale por la parte inferior del lecho empacado, entra en contacto con la corriente gaseosa de alimentación antes que entre al lecho empacado, experimentándose en ese instante transferencia de masa y calor entre las fases, con un enfriamiento adicional en la fase líquida, que es despreciable en la mayoría de las veces, pero entre mas pequeño es el flujo del líquido mayor es la velocidad con la que transfiere calor a la fase gaseosa y mayor el enfriamiento que sufre el líquido. Este fenómeno no es contemplado en los cálculos teóricos en ninguno de los casos, por lo que teóricamente la corriente líquida de salida de la columna no esta expuesta a este enfriamiento adicional, como lo esta la corriente líquida en la realidad, obteniéndose temperaturas teóricas mayores a las experimentales.

La diferencia media entre las temperaturas experimentales y las teóricas en las corridas no adiabáticas, sin tomar en cuenta a las correspondientes a lecturas del rotámetro igual a 1, es 2.3 grados. En cambio para las correspondientes a las lecturas del rotámetro igual a 1, es 16.8 grados.

Para las corridas adiabáticas, la diferencia media entre las temperaturas experimentales y las teóricas, sin tomar en cuenta a las correspondientes a lecturas del rotámetro igual a 1, es 3 grados. En cambio para las correspondientes a las lecturas del rotámetro igual a 1, es 20.6 grados.

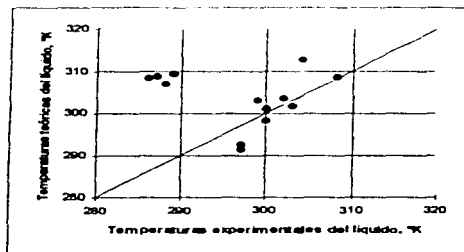


Figura 5.7 Comparación entre las temperaturas experimentales de salida del líquido con las calculadas teóricamente con el modelo no isotérmico, para las corridas adiabáticas

En las figuras 5.8 y 5.9 se muestran las comparaciones entre las temperaturas experimentales en la corriente gaseosa de salida y las determinadas en forma teórica, para las corridas no adiabáticas y las corridas adiabáticas respectivamente. Por lo que puede observarse en las figuras 5.8 y 5.9 para ambos grupos de

experimentos, las temperaturas calculas se encuentran por debajo de las experimentales, esto debe a que el CO_2 absorbido y por lo tanto el calor generado en la absorción en los resultados teóricos es menor al real. Otra causa de tales resultados es el hecho ya mencionado, de la existencia de una menor transferencia de calor teórica que experimental entre la fase líquida y gaseosa (coeficientes de transferencia de calor teóricos mas pequeños)

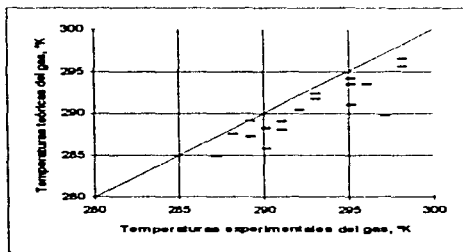


Figura 5.8 Comparación entre las temperaturas experimentales de salida del gas y las calculadas teóricamente con el modelo no isotérmico, para las curvas no adiabáticas

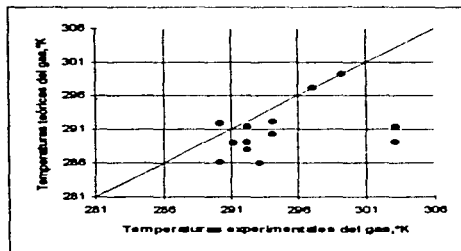


Figura 5.9 Comparación entre las temperaturas experimentales de salida del gas y las calculadas teóricamente con el modelo no isotérmico, para las curvas adiabáticas

Las temperaturas de las corrientes gaseosas de salida presentan una diferencia media entre los valores experimentales y los calculados teóricamente de 2.6 grados en promedio, para las corrientes no adiabáticas, y para las corrientes adiabáticas la diferencia media entre las temperaturas experimentales de la corriente gaseosa y las calculadas teóricamente es de 4.1 grados.

5.3 Comparación entre la concentración de MEA experimental y la determinada teóricamente.

Como un punto especial en el análisis de datos, es importante hacer mención sobre las diferencias presentadas entre las concentraciones experimentales y las determinadas teóricamente de la MEA en el líquido enriquecido de CO_2 a la salida de la columna (tabla F 7, tabla F 8 y tabla F 9). La importancia de este hecho radica en que siempre es mayor la concentración de MEA determinada experimentalmente que la determinada en forma teórica, a pesar de que experimentalmente el CO_2 se absorbe en mayor cantidad que el absorbido en forma teórica. La consecuencia de una mayor absorción del CO_2 de una forma experimental, que de una forma teórica, es que reacciona químicamente más MEA en el primer caso que en el segundo, por lo tanto la cantidad de MEA sin reaccionar experimentalmente en el líquido de salida de la columna debe ser menor que la cantidad de MEA sin reaccionar determinada teóricamente, lo que no sucede en este caso, como ya se mencionó.

Las discrepancias mencionadas anteriormente se deben a las reacciones químicas reversibles que se presentan con la absorción del CO_2 , pues estas originan un sistema químico que no es igualmente titulable al sistema $\text{MEA}-\text{H}_2\text{O}$ (figura 4.2), pues para que un sistema químico sea titulable es necesario que presente una variación del pH en el punto de equivalencia lo suficientemente grande para incluir el intervalo de pH en el cual cambia el color del indicador lo que no sucede para este sistema, como lo muestra la figura 5.10.

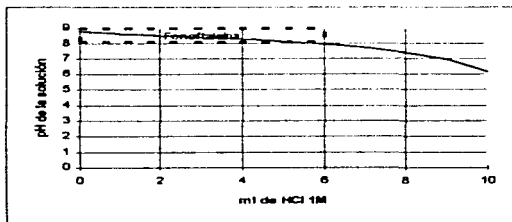


Figura 5.10 Curva de titulación para 5 ml de una solución acuosa de MEA 15.3% y 0.2 moles de CO_2 moles de MEA a 298.15°K con HCl 1M

Por todo lo anterior se recomienda el procedimiento utilizado por Keh-Feng²⁸ para determinar las concentraciones del líquido enriquecido con CO_2 , donde se determina la concentración total de CO_2 absorbido en las soluciones acuosas de MEA, en lugar de determinar la concentración de MEA sin reaccionar. El procedimiento consiste en añadir una alícuota del líquido enriquecido con CO_2 a un recipiente que contiene una solución en exceso de NaOH 1M, de esta forma el CO_2 que no ha reaccionado con la MEA, se transforma en especies iónicas no volátiles. Una vez agregada la solución de NaOH , es adicionada una solución de BaCl_2 en exceso a la solución, con vigorosa agitación para permitir que todo el CO_2 absorbido (física y químicamente) precipite como BaCO_3 , entonces el exceso de NaOH es titulado con una solución de HCl usando fenofaleína como indicador. Por último usando anaranjado de metilo como indicador una solución de HCl es adicionada. La cantidad de HCl adicionada puede ser utilizada para calcular la solubilidad del CO_2 en términos de moles de CO_2 por mol de MEA.

Es importante aclarar que la determinación experimental de la concentración de la fase líquida a la salida de la columna, sólo es un parámetro adicional para el análisis de resultados, dado que este no es necesario para caracterizar al sistema de absorción, porque el conocimiento de las concentraciones del CO_2 en la fase gaseosa a la entrada y salida a la columna, así como la concentración de la fase líquida de alimentación son suficientes para determinar el grado de absorción del sistema y por lo tanto su funcionamiento.

5.4 Comparación entre el porcentaje de absorción experimental determinado en las corridas no adiabáticas y el determinado en las corridas adiabáticas.

Como se mencionó anteriormente, el incremento del coeficiente de transferencia de masa, la disminución de la fuerza impulsora a la transferencia de masa y la disminución de la solubilidad del CO_2 , son los parámetros que determinan si el grado de absorción disminuye o aumenta con los incrementos de temperatura del sistema al absorberse el CO_2 en las soluciones acuosas de MEA. Teóricamente observamos, que los incrementos de temperatura sufridos por el sistema, en lugar de disminuir el grado de absorción como se esperaba, lo aumentaban, porque el aumento en el coeficiente de transferencia de masa era más significativo que la disminución de la fuerza impulsora y la disminución de la solubilidad del CO_2 . Para determinar si experimentalmente sucede el mismo fenómeno, en el primer grupo de experimentos se permitió que la columna tuviera libre intercambio de calor con los alrededores (corridas no adiabáticas) y en el segundo grupo de experimentos se aisló la columna (corridas adiabáticas), con la intención de que el sistema experimentara incrementos de temperatura mayores en las corridas adiabáticas que los experimentados en las corridas no adiabáticas.

En el proceso de absorción del CO_2 en soluciones acuosas de MEA el número de variables que influyen sobre el grado de absorción es grande, y algunas de ellas son difíciles de controlar, como es el caso de la temperatura ambiente, por lo que en los experimentos no se intentó establecer los mismos valores de las variables entre las corridas no adiabáticas y las corridas adiabáticas, pero tampoco se manejaron diferencias muy grandes entre las variables de ambos grupos de experimentos, esto, con la intención de poder establecer

parámetros generales que permitieran caracterizar al sistema de absorción, únicamente como función principal de los flujos de alimentación y la diferencia en los aumentos de temperatura entre las corridas no adiabáticas y las corridas adiabáticas.

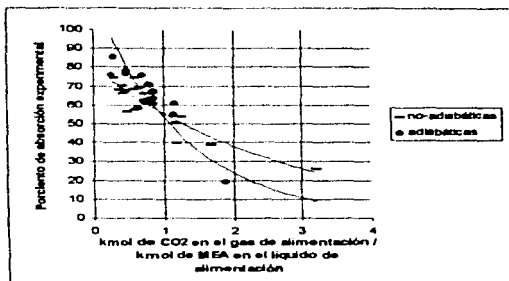


Figura 5.11 Comparación entre las corridas experimentales no adiabáticas y adiabáticas

En la figura 5.11 se muestra el porcentaje de absorción experimental graficado contra la relación entre el número de moles de CO_2 en el corriente gaseosa de alimentación y el número de moles de MEA en la corriente líquida de alimentación (Y_1^*) para las corridas no adiabáticas y las corridas adiabáticas. Los puntos obtenidos en la gráfica se ajustaron a una curva exponencial para cada grupo de experimentos. Al observar los puntos de la figura 5.11 y las curvas organizadas a partir de estos, en general, se ve que el porcentaje de absorción determinado en las corridas adiabáticas es mayor al determinado en las corridas no adiabáticas a valores bajos de Y_1^* , pero a medida que aumenta Y_1^* , el porcentaje de absorción adiabático disminuye más rápidamente de lo que lo hace el porcentaje de absorción no adiabático, hasta que el porcentaje de absorción determinado con ambos grupos de experimentos se iguala alrededor de un valor de Y_1^* de 0.9. Después de este punto el porcentaje de absorción adiabático continúa disminuyendo más rápidamente que el porcentaje de absorción no adiabático, hasta el grado que el porcentaje de absorción es mayor para las corridas no adiabáticas que para las adiabáticas. Como el grado de calentamiento sufre por el sistema de absorción es mayor para las corridas adiabáticas que para las no adiabáticas debido al aislamiento de la columna, y el grado de absorción es mayor para las corridas adiabáticas que para las no adiabáticas a valores de Y_1^* menores a 0.9, entonces para este intervalo de Y_1^* el aumento de temperatura tiene un mayor efecto sobre el incremento del coeficiente de transferencia de masa, que sobre la disminución de la fuerza impulsora y la disminución de

la solubilidad del CO_2 , por lo que el efecto global es un aumento del porcentaje de absorción con incrementos de temperatura para valores de Y_1^* menores a 0.9. Alrededor de Y_1^* igual a 0.9 no existe diferencia significativa entre el grado de absorción obtenido con ambos grupos de experimentos, entonces el aumento del coeficiente de transferencia de masa se ve compensado con la disminución de la fuerza impulsora y la disminución de la solubilidad del CO_2 , resultando un efecto global poco significativo sobre el porcentaje de absorción al aumentar la temperatura alrededor de este valor de Y_1^* . A valores de Y_1^* mayores a 0.9 el grado de absorción es menor para las corridas adiabáticas que para las no adiabáticas, por lo que la disminución de la fuerza impulsora y la disminución de la solubilidad del CO_2 son más importantes que el aumento del coeficiente de transferencia de masa con los incrementos de la temperatura, obteniéndose como efecto global la disminución del grado de absorción con el incremento de la temperatura, para este rango de valores de Y_1^* .

Al observar la figura la figura 5.11, también es importante notar que en general, la diferencia entre el porcentaje de absorción solo es ligeramente superior para las corridas adiabáticas, que para las corridas no adiabáticas antes de Y_1^* igual a 0.9, y en algunos casos puede invertirse la situación, dependiendo de las condiciones de operación particulares, por lo tanto, para obtener una diferencia significativa entre el porcentaje de absorción en los experimentos implementados para el estudio didáctico de este sistema de absorción, como función del calentamiento del sistema, se recomienda establecer valores de Y_1^* mucho mayores a 0.9.

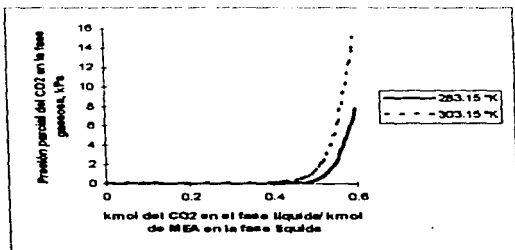


Figura 5.12 Curva de equilibrio a diferentes temperaturas para el sistema CO_2 -MEA- H_2O , en una solución de 15.3 % peso de MEA

La explicación de la dependencia del grado de absorción sobre el valor de Y_1^* se obtiene a partir de la observación de la curva de equilibrio para el sistema a diferentes temperaturas, que se muestra en la figura 5.12. Como se observa en esta figura la presión parcial del CO_2 es muy pequeña a valores bajos de Y_1 (moles

de CO_2 en la fase líquida / moles de MEA en la fase líquida), pero se llega a un punto donde la presión parcial del CO_2 se incrementa enormemente. Lo particular de este punto es, que es aproximadamente el resultado de multiplicar el valor de Y_1^* de 0.9 por fracción absorbida correspondiente, esto es (0.9×0.58) cuyo resultado es 0.52, que es al valor aproximado de Y_1 a partir del cual la presión parcial del CO_2 se incrementa en forma considerable. Como puede observarse, antes de este punto la presión parcial del CO_2 es una función muy débil de la temperatura, por lo que la solubilidad del CO_2 en las soluciones acuosas de MEA y la fuerza impulsora a la transferencia de masa solo disminuyen muy poco con los mayores incrementos de la temperatura que se presentan en la corrientes adiabáticas, siendo el aumento del coeficiente de transferencia de masa el que determina un mayor grado de absorción para las corrientes adiabáticas que para las no adiabáticas. Después de este punto la presión parcial del CO_2 es una función importante de la temperatura, aumentando la presión parcial al incrementarse la temperatura, por lo que la solubilidad del CO_2 y la fuerza impulsora a la transferencia de masa disminuyen más considerablemente de lo que aumenta el coeficiente de transferencia de masa, con los mayores incrementos de temperatura que se presentan en las corrientes adiabáticas, por lo que la situación se invierte, obteniéndose grados de absorción menores para las corrientes adiabáticas que para las no adiabáticas.

Para verificar la dependencia de la solubilidad del CO_2 con respecto a la temperatura en las soluciones acuosas de MEA, por debajo del valor de Y_1^* de 0.9, la columna se equipó con un serpentín, con la intención, primero, de suministrar calor al sistema con agua de calentamiento, y después eliminar calor del sistema con agua de enfriamiento. En el primer caso se obtuvo un porcentaje de absorción de 60.3 y 65.4 para el segundo caso (Y_1^* de 0.75 y 0.65 respectivamente). Como puede observarse la diferencia entre el grado de absorción obtenido entre ambos grupos de experimentos es pequeña, como se esperaba al observar la figura 5.11, a pesar de que la temperatura en el serpentín difiere en 15 grados entre cada caso en promedio.

CONCLUSIONES

Los fenómenos de generación y transferencia de calor que ocurren en el proceso de absorción del bióxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina dentro de una columna empacada, ocasionan que las simplificaciones usuales que se hacen en su diseño, como son: condiciones isotérmicas, contrahución equimolar y flujo unidireccional sólo se cumplan en pequeñas secciones de una columna.

La absorción experimental del bióxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina, puede predecirse para el presente sistema con una desviación promedio aproximada de 25% por debajo del valor real, con un modelo no isotérmico. En el caso de la aproximación isotérmica, esta predice el porcentaje de absorción con una desviación promedio aproximada de 30% por debajo del valor real. La diferencia entre el porcentaje de absorción real y el determinado teóricamente se debe a la incertidumbre en el cálculo de las propiedades físicas, pues en ninguna caso se considera el efecto que tienen las reacciones químicas sobre dichas propiedades. El error que se comete al calcular el porcentaje de absorción con la aproximación isotérmica, en lugar del modelo no isotérmico, en promedio, es de aproximadamente 9 %, siempre obteniéndose un porcentaje de absorción menor con la aproximación isotérmica que con el modelo no isotérmico.

La aproximación isotérmica predice un porcentaje de absorción menor al determinado con el modelo no isotérmico, porque el incremento de temperatura que predice el modelo no isotérmico en el sistema, no sólo disminuye la solubilidad del CO_2 en las soluciones acuosas de MEA, también incrementa la velocidad de reacción del CO_2 con MEA, lo que ocasiona un incremento del coeficiente de transferencia de masa, que es más significativo que la disminución de la solubilidad del CO_2 en las soluciones acuosas de MEA, provocando un porcentaje de absorción mayor con el incremento de la temperatura.

La estimación teórica de las temperaturas experimentales de la fase gaseosa y la fase líquida, se puede establecer con una diferencia máxima de 5 grados aproximadamente. Las diferencias entre las temperaturas teóricas y experimentales, se debe principalmente, a la incertidumbre en el cálculo de la transferencia de calor de la columna con los alrededores y en la estimación de los coeficientes de transferencia de calor.

Experimentalmente el efecto de los incrementos de temperatura que sufre el sistema, sobre el grado de absorción dependen de la relación entre el número de moles del bióxido de carbono absorbidos y el número de moles de la monoetanolamina en el líquido de alimentación. Si esta relación es menor aproximadamente a 0 %, el aumento de la temperatura tiene un efecto más importante sobre el incremento del coeficiente de transferencia de masa que sobre la disminución de la fuerza impulsora a la transferencia de masa y que sobre la solubilidad del CO_2 , puesto que la solubilidad del CO_2 es una función débil de la temperatura antes de este punto, por lo tanto el resultado global es un grado de absorción del CO_2 mayor con el aumento de la temperatura del sistema. Después de este punto la dependencia de la solubilidad del CO_2 con respecto a la temperatura es más importante, por lo que la disminución de la fuerza impulsora a la

transferencia de masa y la disminución de la solubilidad del CO_2 , son más importantes que el aumento del coeficiente de transferencia de masa, obteniéndose globalmente un menor grado de absorción del CO_2 con el aumento de la temperatura del sistema. Alrededor de este punto existen efectos compensatorios entre el aumento del coeficiente de transferencia de masa y la disminución de la fuerza impulsora a la transferencia de masa, por lo que el efecto global sobre el grado de absorción del CO_2 es despreciable con el incremento de temperatura del sistema. Este punto en términos de la relación entre el número de moles de bióxido de carbono en la corriente gaseosa de alimentación y el número de moles de monoetanolamina en la corriente líquida de alimentación corresponde aproximadamente a 0.9, para el rango de concentraciones, flujos y temperaturas manejados en el presente trabajo. Para estudiar experimentalmente la absorción del CO_2 en soluciones acuosas de MEA con fines didácticos, se recomienda relaciones del número de moles del bióxido de carbono en la corriente gaseosa de alimentación y el número de moles de monoetanolamina en la corriente líquida de alimentación mayores a 0.9, donde las diferencias obtenidas en el porcentaje de absorción son mayores, con los incrementos de temperatura que experimenta el sistema.

APÉNDICE A

HIDRÁULICA

A.1 Flujo de alimentación del gas.

La torre empacada está equipada con una placa de orificio para determinar el flujo de alimentación de la fase gaseosa, la figura A.1 muestra las características físicas de la placa.

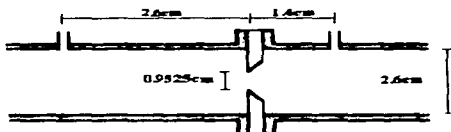


Figura A.1 Placa de orificio para determinar el flujo de alimentación del gas.

El flujo másico del gas a través de la placa de orificio, está dado por la siguiente ecuación:

$$G = 1891 Y d_o \sqrt{\Delta P \rho_g}$$

La relación anterior requiere del conocimiento de dos factores de corrección, el coeficiente de flujo y el factor de expansión. El factor de expansión Y es una función de la relación de los calores específicos (k_{cp}), la relación entre el diámetro del orificio y el diámetro de la tubería (β) y la relación de las presiones absolutas (r). La siguiente relación⁴⁷ permite el cálculo del factor de expansión en el caso subsónico

$$Y = 1 - \frac{(1-r)(0.41 + 0.35\beta^4)}{k_{cp}}$$

donde:

$$r = P_2 / P_1 = 1 - \Delta P / P_1$$

$$\beta = d_o / d_i$$

$$k_{cp} = C_p / C_v$$

La relación es válida para $rc < 1$, donde rc es la relación de presiones crítica, que es la relación de presiones más pequeña capaz de producir la velocidad del sonido. Para este sistema un valor aproximado de rc es 0.53.

La determinación del coeficiente de flujo requiere del conocimiento del número de Reynolds (Re) en base al diámetro de la tubería, y del conocimiento de β . Existe gráficas en la literatura que relacionan estos tres parámetros, pero una ecuación que permite fácilmente calcular el coeficiente de flujo y su programación en computadora es proporcionada por Zigrang¹⁸.

$$C = 0.593 + 0.4\beta^4 + \frac{1.5\sqrt{\beta} + 12\beta^4}{\sqrt{Re}}$$

El coeficiente de flujo depende de la posición de las tomas de presión. La relación anterior aplica cuando las tomas de presión están situadas en la vera contracta, esto es, un diámetro de la tubería antes de la placa y 0.5 diámetros de la tubería después de la placa, aproximadamente.

Para calcular el número de Reynolds necesario en la ecuación anterior se emplea la siguiente ecuación:

$$Re = \frac{4G}{\pi \mu_g d_i}$$

Como puede observarse, el coeficiente de flujo es función del número de Reynolds, a su vez el número de Reynolds es función del flujo a través de la placa de orificio, y el flujo a través de la placa de orificio es función del coeficiente de flujo. Por lo anterior, la determinación del flujo a través de la placa de orificio requiere de la suposición de un valor inicial para el coeficiente de flujo, que es ajustado iterativamente. En el simulador se encuentra una subrutina que proporciona el flujo del gas a través de la placa de orificio.

A.2 Flujo de alimentación del líquido.

Para determinar el flujo del líquido en la alimentación, la columna empacada esta equipada con un rotámetro, donde el flujo del líquido depende de la lectura que se haga en la escala del rotámetro y del fluido para el cual se realiza la calibración del mismo. Como en el presente estudio se manejan soluciones acuosas a diferentes concentraciones, se supuso que el flujo del líquido es una función lineal de la concentración y de la escala del rotámetro, realizándose una regresión lineal múltiple por el método de mínimos cuadrados, obteniéndose la siguiente expresión con un coeficiente de correlación de 0.9741.

$$L1 = 5.3111 \text{ Lec} - 1.0266 \text{ w} - 3.3829$$

El rotámetro se muestra en la figura A.2 y una subrutina en el simulador calcula el flujo de líquido a través del rotámetro.

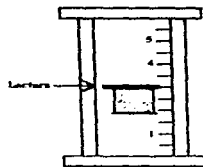


Figura A.2 Rotámetro para la determinación del flujo del líquido de alimentación

A.3 Capacidad de la columna.

Mientras que el grado de separación de un componente en una torre empacada esta determinado por la altura del empaque, la cantidad de gas y líquido que pueden ser tratados en una torre empacada esta determinada por la tendencia de la columna a "inundarse" y el flujo mínimo de líquido.

Existe una gran cantidad de procedimientos para calcular la inundación o punto de inundación, y gran discrepancia entre los resultados que han obtenido diferentes investigadores. La principal razón de estas discrepancias, parece provenir de la inherente ambigüedad en la definición e identificación de la condición de inundación. Comúnmente se define a la inundación " como la condición a la cual todo el espacio vacío en el empaque se llena con líquido y este no fluye a través de la columna." Otra manera común de identificar a la inundación es cuando la caída de presión en la columna tiende a infinito a ciertas velocidades de flujo de líquido y gas, no obstante ninguna de las definiciones anteriores es totalmente correcta, pues ambas identifican a la inundación como un punto bien definido, pero lo cierto es que la inundación corresponde más a un intervalo de velocidades. La afirmación anterior se basa en el hecho de que el líquido no deja de fluir a través del empaque en la inundación, aunque es cierto que un momento determinado existe retención de este en los espacios vacíos del empaque y un gran incremento de la caída de presión en la columna, pero estas condiciones no son estables, regresando la columna en ciertos intervalos de tiempo a condiciones aparentemente "normales". Por todo lo anterior es comprensible porque un criterio común para determinar el diámetro de una torre empacada es hacerlo con velocidades correspondientes al 50% de la inundación. Una definición más acertada sobre la inundación es definirla como el intervalo de velocidades en los cuales la columna no opera correctamente.

Para calcular la caída de presión y la inundación en la torre empacada se utiliza el procedimiento propuesto por Shung-Hang Hsu⁴¹, dada su facilidad de implementación en un programa de computadora.

Shing-Hang Hsu ajusto datos proporcionados en la literatura a la ecuación general, que tiene la siguiente forma:

$$(A/Y)^{0.3n} = 1 + (BX)^n$$

donde:

$$Y = \frac{G^2 F}{8^2 \rho_s \rho_i}$$

$$X = \frac{G_i^2}{L_i^2 \sqrt{\rho_s / \rho_i}}$$

$$n = 0.65$$

A y B son las constantes determinadas por Shing-Hang Hsu¹¹, los valores se muestran en la tabla A.1.

Tabla A.1 Constantes de la correlación generalizada para la caída de presión

ΔP_i in H ₂ O/ft empaque	A	B
Intundación	0.2500	1.300
1.50	0.1650	1.100
1.00	0.1250	1.000
0.50	0.0730	0.900
0.20	0.0340	0.770
0.10	0.0170	0.600
0.05	0.0070	0.420
0.00*	0.0013	0.235

* Extrapolada en el presente trabajo

Como puede observarse en la tabla anterior, las constantes están determinadas a siete diferentes caídas de presión, por lo que la interpolación es necesaria en los casos donde la caída de presión se encuentra entre dos cualesquiera de estos valores. La interpolación se realiza con:

$$\Delta P - \Delta P_1 \left(\frac{\Delta P_2}{\Delta P_1} \right)^{\log \left(\frac{X}{Y} \right)}$$

Las relaciones anteriores permiten el cálculo de la caída de presión y la inundación para cualquier sistema y condiciones de operación, sólo siendo necesario el conocimiento del factor de empaque. El factor de empaque es un parámetro empírico que depende del tipo y tamaño de empaque utilizado. Eckert¹² proporciona valores para los tipos más comunes de empaques. El valor reportado por Eckert para anillos Raschig de cerámica de diámetro nominal de 0.5 in es de 580 l/ft. Este valor fue obtenido a partir de datos experimentales en columnas industriales y no en columnas de plantas piloto, donde el efecto de pared debido al diámetro de la columna causa una elevación de más del doble en la caída de presión.¹³ Como puede verse en la figura A.3 la caída de presión experimental y la calculada teóricamente con el factor de empaque de 580 l/ft, difieren considerablemente, por lo que estimación de un factor de empaque propio para la columna en cuestión es necesaria. Utilizando las correlaciones de Shung-Hang Hsu con valores de la caída de presión en la columna determinadas experimentalmente, se calculó un factor de empaque de 1584 l/ft. Las caídas de presión calculadas con este factor se muestran también en la misma figura A.3.

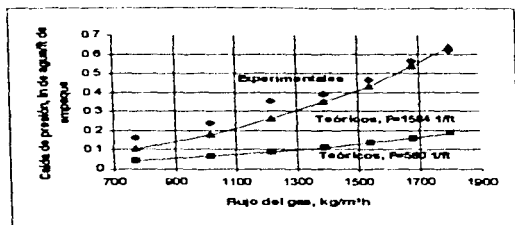


Figura A.3 Caída de presión en la columna para el sistema aire-agua, flujo de líquido 1606 kg/m² h

La figura A.3 muestra claramente como las caídas de presión calculadas con un factor de empaque de 1584 l/ft representan mejor a los datos experimentales. En el simulador se proporciona una subrutina especial para calcular el factor de empaque.

Para un flujo determinado de gas la tendencia de la columna a "inundarse" determina el flujo máximo de líquido que puede ser tratado en la columna. El flujo mínimo de líquido necesario para lograr la separación deseada se establece a partir de la composición del gas de alimentación y la solubilidad del soluto en la corriente líquida en la salida, suponiendo saturación. Críticamente el flujo mínimo de líquido se establece a partir del punto de tangencia entre la curva de operación y la curva de equilibrio. Para calcular el flujo mínimo de líquido ya sea gráfica o analíticamente es necesario estimar la temperatura de salida de líquido para establecer la composición de saturación. El flujo mínimo de líquido sólo es un punto de referencia para

establecer el flujo de líquido que va a tratarse en la realidad, pues para alcanzar la separación deseada en la columna con el flujo mínimo de líquido se requiere una columna de altura infinita, esto significa, que entre mas cercano al flujo mínimo de líquido se encuentre el flujo de líquido a ser tratado, mayor será la altura de la columna necesaria para lograr la separación que se desea. Para calcular los flujos mínimos del líquido mostrados en las tablas F 1, F 2 y F 3, se consideró a las corrientes portadoras constantes, encontrándose que el flujo real de líquido en promedio, es 1.5 veces el flujo mínimo del líquido. En el simulador se cuenta con una subrutina que calcula el flujo mínimo necesario para alcanzar una separación deseada.

A.4 Retención del líquido.

La retención se refiere al líquido retenido en la torre como película que humedece el empaque y al retenerse entre pequeñas lagunas entre las partículas del empaque. La retención total del líquido esta formada por dos partes.

$$\phi t = \phi c + \phi o$$

Cada uno de los tres tipos anteriores de retención esta expresado como volumen del líquido / volumen del empaque. La retención móvil consta del líquido que se mueve a través del empaque y que es reemplazado continuamente por líquido que fluye desde la parte superior de la columna. Al detener los flujos de gas y líquidos, la retención móvil se separa del empaque. La retención estática esta formada por el líquido que permanece retenido en forma de pequeñas lagunas entre las partículas del empaque. Al detener los flujos, la retención estática no se separa. Para calcular la retención total del líquido en el lecho empacado se utilizan las siguientes correlaciones¹.

$$\beta = 1.508 d_s^{0.776}$$

$$\phi c a = \frac{2.47 E - 4}{d_s^{1.21}}$$

$$\phi o a = \frac{(2.09 E - 6)(737.5 L_s)^{\beta}}{d_s^2}$$

$$\phi o c = \phi t a - \phi c a$$

$$H = \frac{C1 L_s^{0.57} \mu_1^{C2} \left(\frac{\sigma_1}{0.073} \right)^{0.1777 - 0.262 \log L}}{\rho_1^{0.084} (2.024 L_s^{0.43} - 1)}$$

$$C1 = 975.7 \text{ y } C2 = 0.13 \text{ para } \mu_1 < 0.012 \text{ Kg/m s}$$

$$C1 = 2168 \text{ y } C2 = 0.31 \text{ para } \mu_1 > 0.012 \text{ Kg/m s}$$

$$\phi o = \phi o c H$$

$$\phi c = \frac{0.0486 \mu_1^{0.02} \sigma_1^{0.29}}{d_s^{1.21} \rho_1^{0.37}}$$

$$\phi t = \phi c + \phi o$$

donde:

$ds = 0.01774$ m para anillos Raschig de cerámica de diámetro nominal de 0.5 m.

A.5 Área Interfacial

Uno de los parámetros hidráulicos más importantes dentro de las operaciones interfaciales de transferencia de masa, es el área interfacial, ya que, la transferencia de masa está directamente determinada por el área interfacial disponible. Para calcular el área interfacial por volumen de lecho empacado, se emplean las siguientes correlaciones proporcionadas por Shulman⁷

$$a = \frac{a_{H_2O}^{max}}{a_{O_2}} = a_{H_2O} H$$

H está definido de la misma forma que en el cálculo de la retención del líquido y a es el área interfacial para la desorción o absorción con agua, dada por:

$$a_{H_2O} = m \left(\frac{808G_L}{\sqrt{\rho_L}} \right)^n L_s^p$$

Los parámetros m , n y p dependen del tipo y tamaño de empaque. Para anillos Raschig de cerámica de diámetro nominal de 0.5 m, tienen los siguientes valores.

$$m = 28.01$$

$$n = 0.2323 \quad L = 0.3$$

$$p = -1.04$$

APÉNDICE B.

COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE CALOR Y MASA

B.1 Altura de una unidad de transferencia (HTU).

La altura de una unidad de transferencia puede definirse como la altura de una sección de empaque que se requiere para conseguir una variación de la concentración igual a la fuerza impulsora media. Las alturas de una unidad de transferencia pueden definirse matemáticamente como

$$HTU_l = \frac{Lm}{k_l a} \quad \text{para el líquido}$$

$$HTU_g = \frac{Gm}{k_g a} \quad \text{para el gas}$$

La correlación⁴³ que permite el cálculo de la altura de una unidad de transferencia para la fase gaseosa esta dada por:

$$HTU_g = \frac{v \left(\frac{D}{0.3048} \right)^a \left(\frac{Z}{3.048} \right)^{1/2} Sc_g^{1/2}}{(737.34 Lf_p f_\rho f_\sigma)^b}$$

donde:

$$a = 1.24 \text{ para anillos}$$

$$b = 0.6 \text{ para anillos}$$

$$f_\mu = (\mu_1 / \mu_2)^{0.16}$$

$$f_\rho = (\rho_1 / \rho_2)^{-1.25}$$

$$f_\sigma = (\sigma_1 / \sigma_2)^{-0.8}$$

$$Sc_g = \mu_g / \rho_g D_{12}$$

El parámetro de empaque depende de el tipo de empaque y del porcentaje de inundación, la estimación de éste, para anillos Raschig de 0.5 in, se puede realizar con la siguiente correlación, obtenida a partir de las graficas de Vital⁴³.

$$\psi = 39.0643 + 4.6329 \text{ PIN} - 0.0425 \text{ PIN}^2 \quad r = 0.9926$$

La altura de una unidad de transferencia para la fase líquida⁴³ esta dada por:

$$HTU_1 = \phi C_f \left(\frac{Z}{3048} \right)^{0.33} Sc_l^{0.5}$$

donde:

$$Sc_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_{1l}}$$

El parámetro de empaque es una función del PIN y de L. Así mismo C_f es una función del porcentaje de inundación, las siguientes relaciones obtenidas de las gráficas de Vital permiten el cálculo del parámetro de empaque y de C_f .

Para el factor de empaque:

$$\phi = 0.01598 - 1.68402E-5 L + 1.2446E-8 L^2 \quad 0 < L \leq 1000 \quad r = 1$$

$$\phi = 0.01074 - 2.0753E-6 L - 9.22409E-12 L^2 \quad 1000 < L \leq 50000 \quad r = 1$$

Para C_f :

$$C_f = 1 \quad \text{PIN} < 50 \%$$

$$C_f = -3.0325 + 0.2838 \text{ PIN} - 4.27014E-3 \text{ PIN}^2 + 1.9953E-5 \text{ PIN}^3 \quad 50\% < \text{PIN} < 100\% \quad r = 0.9976$$

B.2 Coeficientes de transferencia de calor.

Para anillos Raschig y sillas Berl. Shulman y colaboradores⁷ establecieron la naturaleza de los coeficientes de transferencia de masa. El coeficiente de transferencia de masa del líquido es calculado con:

$$Sh = 25.1 Re_l^{0.43} Sc_l^{0.5}$$

donde:

$$Re_l = \frac{d d L v}{\mu_l}$$

Para estimar el coeficiente de transferencia de calor se utiliza la analogía transferencia de masa-calor en la ecuación anterior, dando por resultado la siguiente expresión.

$$Nu = 25.1 Re_l^{0.43} Pr_l^{0.5}$$

El coeficiente de transferencia de masa para el gas está dado por:

$$St_g Sc_g^{2/3} = 1.195 Re_g^{-0.36}$$

donde:

$$Re_g = \frac{d_p G_g}{\mu_g (1 - \epsilon_o)}$$

en donde ϵ_o es el espacio vacío de operación, definido en términos de la porosidad del empaque y la retención total del líquido, de la siguiente forma

$$\epsilon_o = \epsilon - \phi t$$

Utilizando la analogía de transferencia de calor-masa la ecuación anterior se transforma en:

$$St_g Pr_g^{2/3} = 1.195 Re_g^{-0.36}$$

A partir de la cual se calcula el coeficiente de transferencia de calor del gas.

APÉNDICE C

TRANSFERENCIA DE CALOR CON LOS ALREDEDORES

El primer paso en la determinación de la transferencia de calor de la columna con los alrededores, consiste en determinar el coeficiente de transferencia de calor por convección natural del aire que rodea a la columna, utilizando las siguientes relaciones¹³:

$$\begin{aligned}Gr &= g c d c^3 \rho_m^2 \beta |\Delta T| / \mu_m^2 \\Nu_m &= C (Gr Pr)^m \\C &= 1.27 \text{ y } m = 0.128 \text{ para } 10^{-1} < Gr Pr_m < 10^4 \\C &= 0.59 \text{ y } m = 1/4 \text{ para } 10^4 \leq Gr Pr_m < 10^9 \\C &= 0.13 \text{ y } m = 1/3 \text{ para } 10^9 \leq Gr Pr_m < 10^{12} \\h_{m,n} &= Nu_m k_m / d_c\end{aligned}$$

Las propiedades necesarias¹⁴ para los cálculos se enlistan a continuación.

$$\begin{aligned}k_m &= 2.9E-3 + 7.76E-5 T_m \quad r = 0.9999 \quad 250 \leq T_m \leq 350 \\ \mu_m &= 4.67866E-6 + 45.9E-9 T_m \quad r = 0.9998 \quad 280 \leq T_m \leq 360 \\ \rho_m &= M P / R T_m \\ M &= 28.96 \text{ kg / kmol} \\ R &= 0.082 \text{ m}^3 \text{ atm / kmol}^\circ \text{ K} \\ P &= 1 \text{ atm} \\ Pr_m &= 0.784 - 2.5E-4 T_m \quad r = 0.9976 \quad 250 \leq T_m \leq 350\end{aligned}$$

Una vez que se determina el coeficiente de transferencia de calor convectivo, se calcula el coeficiente global de transferencia de calor para la columna, con el cual se determina la transferencia de calor de la columna con los alrededores utilizando las siguientes relaciones.

$$\begin{aligned}U &= 1 / (r_2 \ln (r_2 / r_1) / k_c + 1 / h_{m,n}) \\ Q &= U (T_L - T_m)\end{aligned}$$

Para calcular el coeficiente de transferencia de calor convectivo, se requiere del conocimiento de la temperatura en la superficie de la columna, que a su vez, requiere del conocimiento del flujo de la transferencia de calor con los alrededores, por lo que el cálculo de la transferencia de calor se realiza de una manera

iterativa, suponiendo un valor inicial para la temperatura de la superficie igual a 2 °K por debajo de la temperatura del aire, se calcula el coeficiente de transferencia global y se ajusta la temperatura de la superficie con la siguiente relación:

$$T_s = U (T_L - T_{\infty}) / h_{\text{conv}} + T_{\infty}$$

los cálculos finalizan en el momento que la diferencia entre dos cálculos consecutivos de la temperatura de superficie es menor a 0.1 °K.

APÉNDICE D

PROPIEDADES FÍSICAS

D.1 Viscosidad de la fase líquida.

La viscosidad de los líquidos decrece exponencialmente con la temperatura bajo condiciones isobáricas o como líquido saturado, y crece insignificadamente con el aumento de la presión, por lo que su comportamiento puede tratarse muy acertadamente sólo como función de la temperatura. Como lo muestra la ecuación de Vogel de tres constantes

$$\ln(\mu_l) = A + \frac{B}{T + C}$$

La ecuación de Vogel fue empleada por DiGiulio¹³ para correlacionar la viscosidad de la MEA pura como función de la temperatura. La ecuación de DiGiulio es

$$\ln(\mu_{MEA}) = -39356 + \frac{10108}{T - 151.17}$$

La viscosidad del agua pura ha sido ampliamente estudiada, una correlación muy precisa es proporcionada por Reid⁶ que tiene la siguiente forma

$$\ln(\mu_{H_2O}) = -24.17 + 4209/T + 0.04527T - 3.376E-05 T^2$$

Meng-Hua Li¹² emplearon el modelo de Grunberg y Nissan para la determinación de la viscosidad de mezclas líquidas a bajas temperaturas, que para mezclas binarias tiene la siguiente forma.

$$\ln(\mu_m) = x_1 \ln(\mu_1) + x_2 \ln(\mu_2) + x_1 x_2 G_{12}$$

donde:

x_1 = fracción mol del compuesto 1 (el compuesto con mas átomos de carbono e hidrógeno)

x_2 = fracción mol del compuesto 2

μ_1 = viscosidad del compuesto 1 a la temperatura del sistema, mPa s

μ_2 = viscosidad del compuesto 2 a la temperatura del sistema, mPa s

G_{12} es una constante que depende de la temperatura y de la naturaleza química del sistema, ésta puede estimarse en base a la contribución de grupos funcionales, o con datos experimentales, ésta última

forma fue la empleada por Meng-Hui Li obteniendo la siguiente ecuación para el caso particular del sistema MEA-H₂O:

$$G_{12} = 372.1 - 3.11 T + 8.8092E-03 T^2 - 8.3457E-06 T^3$$

Las relaciones anteriores permiten determinar la viscosidad del sistema MEA-H₂O a cualquier temperatura dentro del rango de 294 a 353 ° K, y a cualquier concentración de la mezcla. En la tabla D.1 se comparan los valores experimentales reportados por Meng-Hui Li y los calculados con las relaciones anteriores.

Tabla D.1 Viscosidad del sistema MEA-H₂O [mPa s]

Fracción peso	0.2		0.3	
	Calculado	Reportado ²¹	Calculado	Reportado ²²
303.15	1.496	1.480	2.131	2.109
313.15	1.164	1.161	1.609	1.616
323.15	0.938	0.936	1.269	1.277
333.15	0.778	0.778	1.036	1.035
343.15	0.661	0.659	0.869	0.877
353.15	0.571	0.577	0.744	0.732

Porcentaje de desviación promedio 0.64

D.2 Densidad de la fase líquida.

La densidad de las mezclas líquidas es función importante únicamente de la temperatura y la composición. Para el sistema MEA-H₂O se cuenta con datos muy recientes reportados en la literatura^{31,32,33}, los cuales se correlacionaron en el presente trabajo. Para correlacionar los datos experimentales la densidad del sistema MEA-H₂O proporcionados en la literatura, se utilizó el mismo método de Meng-Hui Li²².

Primero se calcula el volumen molar de la mezcla líquida con la siguiente relación:

$$V_m = \frac{x_{MEA} M_{MEA} + x_{H_2O} M_{H_2O}}{\rho_m}$$

Con los volúmenes molares de la mezcla líquida a diferentes temperaturas y composiciones, se calcula el volumen molar de exceso del sistema, a partir de la definición de volumen molar de exceso, de la manera siguiente:

$$V^E = V_m - \frac{x_{MEA} M_{MEA}}{\rho_{MEA}} - \frac{x_{H_2O} M_{H_2O}}{\rho_{H_2O}}$$

La relación anterior requiere del cálculo de las densidades de los líquidos puros a la temperatura del sistema. Meng-Hui Li¹¹ determinó experimentalmente estas densidades a diferentes temperaturas, las correlaciones obtenidas a partir de estos datos son las siguientes:

Para la monoetanolamina.

$$\rho_{MEA} = 1.28361 - 9.82946E-4 T + 2.57654E-7 T^2$$

Para el agua:

$$\rho_{H_2O} = 0.81084 + 1.545E-3 T - 3.0844E-6 T^2$$

Una ecuación del tipo de Redlich-Kister para el volumen molar de exceso, se emplea para obtener la funcionalidad entre la densidad de la mezcla líquida, la temperatura y la composición, la ecuación es la siguiente:

$$V^E = x_1 x_2 (A_0 + A_1(x_1 - x_2))$$

$$A_i = a_i + b_i T + c_i T^2$$

Obteniéndose los siguientes resultados:

$$A_0 = 20.963 - 0.18249 T + 3.29582E-04 T^2$$

$$A_1 = 23.0844 - 0.19754 T + 3.70423E-04 T^2$$

Las relaciones anteriores permiten el cálculo de la densidad del sistema MEA-H₂O a cualquier temperatura y composición. Los resultados se muestran en la tabla D.2.

Tabla D.2 Densidad del sistema MEA-H₂O [g / cm³]

Fracción peso	0.2		0.3	
	Calculado	Reportado ¹¹	Calculado	Reportado ¹¹
T °K				
303.15	1.0036	1.0036	1.0083	1.0081
308.15	-----	-----	1.0059	1.0060
313.15	0.9992	0.9994	1.0034	1.0034
318.15	-----	-----	1.0007	1.0007
323.15	0.9944	0.9944	0.9980	0.9980
333.15	0.9890	0.9889	0.9922	0.9921
343.15	0.9832	0.9830	0.9859	0.9861
353.15	0.9768	0.977	0.9791	0.9790

Porcentaje de desviación promedio 0.01

D.3 Coeficiente de difusión del CO_2 en soluciones acuosas de MEA.

La determinación experimental de la difusividad del óxido de carbono en soluciones acuosas de alquilaminas, tiene el inconveniente de la reacción química que ocurre entre el óxido de carbono y éstas, debido a lo cual no es posible medirla directamente. Para solventar este inconveniente, se ha empleado un compuesto químico de naturaleza similar al CO_2 , este compuesto es el N_2O .

Para el CO_2 la analogía con N_2O ha sido ampliamente aplicada para estimar la difusividad en soluciones acuosas de alquilaminas. N_2O es similar al CO_2 con respecto a su configuración, volumen molecular y estructura electrónica, pero no reacciona con las alquilaminas. Versteeg¹⁷ estimó el coeficiente de difusión del CO_2 empleando la analogía con el N_2O . En la estimación de Versteeg, primero se calculan los coeficientes de difusión del N_2O y el CO_2 en el agua, con las siguientes correlaciones:

$$D_{\text{CO}_2} = 2.35E - 6e^{-\frac{2110}{T}}$$

$$D_{\text{N}_2\text{O}} = 507E - 6e^{-\frac{2271}{T}}$$

donde T esta en grados Kelvin y Di en m^2/s . El coeficiente de difusión para el N_2O en la solución se calcula de acuerdo con la relación modificada de Stokes-Einstein:

$$\left(D_{\text{N}_2\text{O}} \mu^{0.8} \right)_{\text{sol. amoniac}} = \left(D_{\text{N}_2\text{O}} \mu^{0.8} \right)_{\text{agua}}$$

El coeficiente de difusión del CO_2 en la solución de amoníaco entonces se calcula usando la analogía con el N_2O :

$$\left(\frac{D_{\text{N}_2\text{O}}}{D_{\text{CO}_2}} \right)_{\text{sol. amoniac}} = \left(\frac{D_{\text{N}_2\text{O}}}{D_{\text{CO}_2}} \right)_{\text{agua}}$$

Este es el método empleado para determinar el coeficiente de difusión del óxido de carbono en las soluciones acuosas de MEA.

D.4 Coeficiente de difusión de la MEA en soluciones acuosas de MEA.

Para determinar el coeficiente de difusión de la MEA en soluciones acuosas de MEA se utilizó la correlación proporcionada por Erwin D. Snijder²¹. Una relación simple entre la temperatura y la concentración de la solución acuosa. La correlación es la siguiente:

$$\ln(D_{MEA}) = -13275 - \frac{21983}{T} - 78142E - 5C_{MEA}$$

donde:

C_{MEA} = concentración de la MEA, gmol/m³

D.5 Viscosidad de la fase gaseosa.

La viscosidad de los sistemas gaseosos ha sido ampliamente estudiada y se dispone de un gran número de métodos predictivos para calcularla como función de la temperatura, presión y composición. Para el sistema de interés en el presente trabajo (aire, agua y bioóxido de carbono) se empleó el método de Chung dado su facilidad de programación y su mejor exactitud comparativamente con otros métodos⁸. A continuación se describe el procedimiento de cálculo del método general de Chung.

En el método de Chung primero se calculan los parámetros de energía y los diámetros de colisión de los compuestos individuales, con las siguientes ecuaciones

$$\sigma = 0.809 V_c$$

$$\epsilon / k = T_c / 1.2593$$

Con los valores individuales, se calculan todos los valores cruzados de la siguiente forma:

$$\left(\frac{\sigma}{k}\right)_y = \sqrt{\left(\frac{\sigma}{k}\right)_i \left(\frac{\sigma}{k}\right)_j}$$

$$\sigma_y = \sqrt{\sigma_i \sigma_j}$$

$$\omega_y = \frac{\omega_i + \omega_j}{2}$$

$$\kappa_y = \sqrt{\kappa_i \kappa_j}$$

$$M_y = \frac{2M_i M_j}{M_i + M_j}$$

A continuación el método de Chung calcula todas las propiedades de mezclas con las siguientes relaciones:

$$\sigma_m^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j \sigma_y^2$$

$$\begin{aligned}
 (\varphi_k)_m &= \frac{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m y_i y_j \sigma_{ij}^2 (\varphi_k)_v}{\sigma_m^2} \\
 M_m &= \left(\frac{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m y_i y_j \sigma_{ij}^2 (\varphi_k)_v \sqrt{M_{ij}}}{(\varphi_k)_m \sigma_m^2} \right)^2 \\
 \omega_m &= \frac{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m y_i y_j \sigma_{ij}^2 \omega_{ij}}{\sigma_m^2} \\
 \kappa_m &= \frac{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m y_i y_j \kappa_{ij}}{\sigma_m^2} \\
 \eta_m^2 &= \sigma_m^2 \frac{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m y_i y_j (\eta_i \eta_j)^2}{\sigma_{ij}^2} \\
 T_m &= \frac{T}{(\varphi_k)_m} \\
 Tc_m &= 1.259 \sqrt{(\varphi_k)_m} \\
 Vc_m &= \frac{\sigma_m^2}{0.809^2} \\
 \eta_m &= \frac{1311 \eta_m}{\sqrt{Tc_m Vc_m}}
 \end{aligned}$$

Entonces un factor (F_{cm}) que responde a las formas moleculares y polaridad de gases diluidos es calculado de la siguiente forma:

$$F_{c_m} = 1 - 0.275\omega_m + 0.059035\eta_m^4 + k_m$$

La integral de colisión esta dada para el método de Chung por la siguiente expresión:

$$\Omega_m = 1.161457 \omega_m^{-0.14974} + 0.52487 \rho_m^{-0.7721} \omega_m + 2.16178 \rho_m^{-2.42787} \omega_m$$

Para la corrección de la viscosidad por el efecto de la presión Chung define los siguientes parámetros:

Tabla D.3 Coeficientes de Chung *

$$E v_i = a_i + b_i a_m + c_i \eta_m^2 + d_i \kappa_m$$

i	a _i	b _i	c _i	d _i
1	6.324	50 412	-51.68	1189
2	1.21E-3	-1.154E-3	-6.257E-3	0.03728
3	5.283	254.209	-168.48	3898
4	6.623	38 096	-8.464	31.42
5	19.745	7.63	-14.354	31.53
6	-1.9	-12.537	4.985	-18.15
7	24.275	3.45	-11.291	69.35
8	0.7972	1.117	0.01235	-4.117
9	-0.2382	0.0677	-0.8163	4.025
10	0.06863	0.3479	0.5926	-0.727

$$Y = \rho V_{cm}/6$$

$$G_1 = \frac{1 - 0.5Y}{(1 - Y)^2}$$

$$G_2 = \frac{E v_1 (1 - e^{-E v_1 r}) + E v_2 G_1 e^{E v_1 r} + E v_3 G_1}{Y E v_1 E v_4 + E v_2 + E v_3}$$

$$\mu^* = E v_7 r^2 G_2 e^{E v_7 r / \Omega_m} + E v_8 / \Omega_m$$

$$\mu^* = \frac{\sqrt{T_m} F c_m (G_2^{-1} + E v_8)}{\Omega_m} + \mu^*$$

donde:

ρ = es la densidad de la mezcla gaseosa como función de la temperatura, presión y composición.

Por último la viscosidad de la mezcla gaseosa esta dada por la siguiente ecuación:

$$\mu = \frac{36.344 \sqrt{M_m T c_m} \mu^*}{\sqrt{V c_m^2}}$$

Aunque no se dispone de datos experimentales de la viscosidad del sistema CO₂-H₂O-N₂-O₂-Ar, si se dispone de datos individuales del CO₂, H₂O y Aire. En las tablas D.4 y D.5 se enlistan las propiedades físicas

de los compuestos individuales⁸ empleadas en los cálculos de viscosidad, así como valores reportados en literatura^{3,6} del aire, CO₂ y H₂O comparados con los valores teóricos calculados con el método de Chung.

D.4 Propiedades críticas de los compuestos de la fase gaseosa

Compuesto	M	Tc [°K]	Vc [cm ³ /gmol]	Pc [bar]	Zc	ω	η [debye]	κ
H ₂ O	18.015	647.3	57.1	221.2	0.235	0.344	1.8	0.076
CO ₂	44.01	304.1	93.9	73.8	0.274	0.239	0.0	0.000
N ₂	28.013	126.2	89.8	33.9	0.290	0.039	0.0	0.000
O ₂	31.999	154.6	73.4	50.4	0.288	0.025	0.0	0.000
Ar	39.948	150.8	74.9	48.7	0.291	0.001	0.0	0.000

D.5 Viscosidades de los gases individuales

μ [mPa s]	Aire		H ₂ O		CO ₂	
	Calculado	Reportado	Calculado	Reportado	Calculado	Reportado
T °K						
273.15	0.01706	0.01716	-----	-----	-----	-----
293.15	0.01803	0.01813	-----	-----	0.0145	0.0146
313.15	0.01897	0.01908	-----	-----	-----	-----
333.15	0.01989	0.01999	-----	-----	-----	-----
353.15	0.02078	0.02087	-----	-----	-----	-----
373.15	0.02165	0.02173	0.0134	0.0127	-----	-----

Porcentaje de desviación promedio 1.13

La tabla D.5 le da validez al método de Chung para predecir la viscosidad tanto de soluciones (aire) como la de compuestos individuales (CO₂ y H₂O)

D.6 Densidad de la fase gaseosa.

Al igual que la viscosidad de la fase gaseosa la densidad de la fase gaseosa han sido ampliamente estudiada, por lo que existe una gran cantidad de métodos y ecuaciones para determinar, por lo que el problema consiste en seleccionar aquella ecuación que aplique al sistema y condiciones de operación de interés. En este caso en particular, las presiones de operación están comprendidas en el rango de bajas (entre 1 y 3 atm), las temperaturas de operación se encuentran entre la temperatura ambiente y un máximo de 60 °C que son temperaturas moderadas, y por último todos los compuestos del sistema, salvo el agua, no son polares, además el agua será siempre un soluto con respecto al aire y el dióxido de carbono. Por todo lo anterior es de esperarse que sólo existan pequeñas desviaciones con respecto al comportamiento ideal, para estas circunstancias Reid⁹ y Walas¹¹ recomiendan la utilización de la ecuación virial truncada hasta el segundo

coeficiente virial, siendo esta la empleada en el presente trabajo para determinar la densidad de la fase gaseosa. A continuación se hace la descripción del método de cálculo.

El primer paso a realizar en el cálculo de la densidad de la fase gaseosa es el cálculo de las propiedades cruzadas de la temperatura crítica, volumen crítico, presión crítica, etc. En los cálculos se emplean las siguientes relaciones.

$$Tc_g = (1 - k_g) \sqrt{Tc_i - Tc_j}$$

$$Zc_g = \frac{Zc_i + Zc_j}{2}$$

$$Vc_g = \frac{(Vc_i^{1/3} + Vc_j^{1/3})^3}{8}$$

$$a_g = \frac{a_i + a_j}{2}$$

$$Pc_g = \frac{Zc_g RTc_g}{Vc_g}$$

$$Tr_g = \frac{T}{Tc_g}$$

$$B_g^0 = 0.1445 - 0.33/Tr_g - 0.1385/Tr_g^2 - 0.0121/Tr_g^3 - 0.000607/Tr_g^4$$

$$B_g^1 = 0.0637 + 0.33/Tr_g^2 - 0.423/Tr_g^3 - 0.008/Tr_g^4$$

$$B_u = \frac{RTc_u (B_u^0 + a_u B_u^1)}{Pc_u}$$

$$\delta_g = 2B_g - B_u - B_H$$

Una vez calculadas las propiedades cruzadas, se calcula el segundo coeficiente virial y la densidad de la mezcla de la siguiente forma:

$$B_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j B_{ij}$$

$$Z_m = 1 + \frac{PB_m}{RT}$$

$$M_m = \sum_{i=1}^n y_i M_i$$

$$\rho_m = \frac{PM_m}{Z_m RT}$$

Las propiedades críticas de los compuestos individuales son las mismas que las empleadas en el cálculo de la viscosidad con el método de Chung. Los parámetros de interacción binaria necesarios para el cálculo se enlistan en la tabla D.6.

Tabla D.6 Parámetros de interacción binaria¹¹

	H ₂ O	CO ₂	N ₂	O ₂	Ar
H ₂ O	0	0.14	0.35*	0.35*	0.35*
CO ₂	-----	0	0.30	0.05*	0.35
N ₂	-----	-----	0	0.002*	0
O ₂	-----	-----	-----	0	0.01
Ar	-----	-----	-----	-----	0

* Estimados según Tarakad.

D.7 Coeficientes de difusión en la fase gaseosa.

La teoría que describe la difusión en mezclas gaseosas binarias a presiones bajas y moderadas ha sido satisfactoriamente desarrollada. Chapman y Enskog trabajando en forma independiente con la teoría cinética de los gases obtuvieron el mismo resultado, que permite la estimación del coeficiente de difusión con resultados satisfactorios, su ecuación es la siguiente:

$$D_{AB} = \frac{2.06E - 277T^{1.5}}{\sqrt{M_{AB}} P \sigma_{AB} \Omega_D}$$

donde,

$$M_{AB} = \frac{2}{M_A^{-1} + M_B^{-1}}$$

Las siguientes relaciones permiten el cálculo del diámetro de cohesión y de la integral de cohesión.

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}$$

$$\left(\frac{\epsilon}{k}\right)_{AB} = \sqrt{\left(\frac{\epsilon}{k}\right)_A \left(\frac{\epsilon}{k}\right)_B}$$

$$I_{AB} = \frac{I}{\left(\frac{\epsilon}{k}\right)_{AB}}$$

$$\Omega_D = 1.060767_m^{-0.1561} + \frac{0.193}{D^{0.24857}} + \frac{103587}{D^{1.13266}} + \frac{176474}{D^{1.66411}}$$

Una vez que los coeficientes de difusión binaria son calculados, el cálculo del coeficiente de difusión de un compuesto determinado dentro de una mezcla de tres o más componentes se calcula de la siguiente forma:

$$D_{i,m} = \frac{1 - y_i}{\sum_{j=1}^n \frac{y_j}{D_{ij}}} \quad j \text{ diferente de } i$$

El procedimiento anteriormente descrito se empleó en el presente trabajo para calcular los coeficientes de difusión del sistema aire-agua-dióxido de carbono. En las tablas D 7 y D 8 se enlistan los parámetros de energía y diámetros de colisión de los compuestos individuales empleados en los cálculos y se hace una comparación entre los valores calculados y los reportados en la literatura^{2,4,8} para sistemas binarios.

Tabla D 7 Diámetro de colisión y parámetro de energía

Compuesto	$\sigma \times 10^{10}$ [m]	ϵ_a / k [°K]
CO ₂ *	3.941	195.2
H ₂ O*	2.464	956.0
Aire	3.711	76.6

*Estimados según Brokaw⁴.

Tabla D 8 Coeficientes de difusión binaria

Sistema	T [°K]	D _{AB} × 10 ⁶ [m ² /s]	
		Calculado	Reportado
Aire-CO ₂	317	0.173	0.177
	276	0.134	0.142
Aire-H ₂ O	313	0.236	0.288
CO ₂ -H ₂ O	307	0.157	0.198
	352.3	0.207	0.245

Porcentaje de desviación promedio 12.4

D.8 Capacidad calorífica de la fase líquida.

Para determinar la capacidad calorífica del agua como función de la temperatura se empleó la siguiente correlación obtenida directamente de la literatura¹.

$$C_{p,20} = 18.2964 + 0.472118T - 1.33878E-3T^2 + 1.31424E-6T^3$$

La capacidad calorífica de la MEA se determinó por el método de contribución de grupos sugerido por Misenard ⁴, las contribuciones de los grupos están dadas en la tabla D.9.

Tabla D.9 Contribución de grupos para la capacidad calorífica molar de líquidos

Grupo \ T [°K]	248	273	298	323	348	373
-CH ₂	27.2	27.6	28.2	29.1	29.9	31.0
-OH	27.2	33.5	43.9	52.3	61.7	71.1
-NH ₂	58.6	58.6	62.8	66.9	—	—

El método de contribución de grupos sólo proporciona las capacidades caloríficas a las temperaturas indicadas en la tabla anterior, para determinar la capacidad calorífica a otras temperaturas, los valores obtenidos con el método de contribución de grupos se correlacionaron en la siguiente relación

$$C_{p,liq} = 2736.114 - 27.600426 T + 0.090672 T^2 - 1.088E-4 T^3$$

La capacidad calorífica de las soluciones acuosas de MEA, se determinaron sumando el producto de la capacidad calorífica de los compuestos individuales por sus respectivas fracciones mol.

D.9 Capacidad calorífica de la fase gaseosa.

Como se ha mencionado en secciones anteriores las condiciones de temperatura y presión de interés, son tales, que la fase gaseosa sólo presenta pequeñas desviaciones del comportamiento de los gases ideales. Por lo que las capacidades caloríficas de los compuestos individuales en la fase gaseosa y su mezcla se tomaron como las de gases ideales. En la tabla D.10 se muestran los valores de las capacidades caloríficas de gases ideales⁵ como función de la temperatura de los compuestos individuales.

Tabla D.10 Capacidades caloríficas de gases ideales

$$C_{p,i} = a + bT + cT^2 + dT^3, \text{ J/gmol } ^\circ\text{K}$$

Compuesto	a	b x 10 ³	c x 10 ⁵	d x 10 ⁸
H ₂ O	32.24	1.924	10.55	-3.96
CO ₂	19.8	73.44	-56.02	17.15
N ₂	31.15	-13.57	26.8	-11.68
O ₂	28.11	-0.00368	17.46	-10.65
Ar	20.8	0	0	0

Para calcular la capacidad calorífica de mezclas ideales se sumaron el producto de las capacidades caloríficas de los compuestos individuales por sus respectivas fracciones mol

D.10 Tensión superficial.

La tensión superficial es una de las propiedades físicas para la cual los datos experimentales son más escasos, por lo que en el presente trabajo se hizo necesario recurrir a métodos predictivos para estimar la tensión superficial de la monoetanolamina y su solución acuosa. Lamentablemente no se dispone de ningún dato experimental para comprobar los resultados obtenidos, excepto en el caso del agua.

Para poder determinar la tensión superficial de soluciones acuosas es necesario, primeramente, determinar las tensiones superficiales de los compuestos puros como función de la temperatura. Para el caso del agua, se dispone de datos reportados en literatura¹⁰, los cuales se muestran en la tabla D.11, con la correlación obtenida a partir de estos.

Tabla D.11 Tensión superficial del agua

T [°K]	σ_{20} [dinas/cm]	
	Calculado	Reportado
273.15	75.66	75.64
293.15	72.71	72.75
313.15	69.56	69.56
333.15	66.20	66.18
353.15	62.62	62.61
373.15	58.84	58.85

Porcentaje de desviación promedio 0.02

$$\sigma_{20} = 94.8973 + 1.1509E-3 T - 2.6205E-4 T^2$$

La tensión superficial de la MEA se determinó a partir de la correlación de Macleod-Sugden⁸, que sugiere que la tensión superficial y las densidades del líquido y vapor, están relacionadas con la siguiente ecuación:

$$\sqrt{\sigma} = [P](\rho_l - \rho_g)$$

Donde Sugden llamó al parámetro independiente de la temperatura [P], el "parachor", que se estima a partir de la estructura molecular de la molécula. Para la monoetanolamina los valores de los grupos funcionales que contribuyen el parachor se muestran en la tabla D.12.

Tabla D.12 Contribuciones estructurales para calcular el Parachor.

Grupo	Valor
-CH ₂ -	40.0
-OH	29.8
-NH ₂	42.5

P, se calcula sumando los valores de los grupos funcionales integrantes de la molécula, es decir [P] es igual a 152.3 para la MEA, pues esta está formada por un grupo alcohol, una amina y dos grupos metil.

Una vez calculado [P], se necesita conocer la densidad de la sustancia, si la densidad esta en g/mol / cm³, la tensión superficial estará en dinas / cm. A las temperaturas de operación, la MEA esta muy por de bajo de su punto de ebullición (443.5 ° K), siendo la densidad del gas mucho mas pequeña que la del liquido por lo que puede despreciarse, quedando la expresión reducida a:

$$\sqrt{\sigma_{MEA}} = [P] \rho_l$$

La densidad de la MEA líquida pura se puede calcular con las correlaciones mencionadas anteriormente.

Tamura, Kurata y Odani⁴, son autores de un método para estimar las tensiones superficiales de soluciones acuosas binarias en un amplio rango de concentraciones y pesos moleculares.

Para estimar la tensión superficial de soluciones acuosas Tamura, define las siguientes relaciones:

$$\frac{\Psi_{N_2O}}{\Psi_O} = \frac{x_{N_2O} V_{N_2O}}{x_O V_O}$$

$$B = \log \left(\frac{\Psi_{N_2O}}{\Psi_O} \right)$$

$$W = \frac{0.441 (\sigma_O \sqrt{V_O^2} - q \sigma_{N_2O} \sqrt{V_{N_2O}^2})}{T}$$

$$C = B + W$$

$$\Psi_O^E = (10^C - 1)^{-1}$$

$$\Psi_{N_2O}^E = 1 - \Psi_O^E$$

Y la tensión superficial de la solución esta dada por:

$$\sigma_i = \left(\Psi_{H_2O}^2 \sqrt{\sigma_{H_2O}} + \Psi_{CO}^2 \sqrt{\sigma_{CO}} \right)^4 \cdot \text{dinas/cm}$$

D.11 Conductividad térmica de la fase líquida.

La presión tiene poco efecto sobre la conductividad térmica de los líquidos, un aumento de la temperatura usualmente significa un decremento en la conductividad térmica. Estas características son similares a las presentadas por las viscosidades de los líquidos, aunque la dependencia de la temperatura de la viscosidad es pronunciada y exponencial, mientras que la de la conductividad térmica es casi lineal, como lo muestra la correlación obtenida por Ralph M. DiGiulio¹⁶ para la monocetanolamina

$$\lambda_{MEA} = 0.27719 - 1.2509E-4 T$$

La conductividad térmica del agua a diferencia de la conductividad térmica de la MEA, no sigue un comportamiento lineal con la temperatura como lo muestra la siguiente expresión proporcionada por Reid⁸.

$$\lambda_{H_2O} = -0.3868 + 5.254E-3 T - 6.369E-6 T^2$$

Para determinar la conductividad térmica de mezclas binarias una correlación que ha sido ampliamente probada en muchos tipos de mezclas es la ecuación de Filippov⁸.

$$\lambda_m = w_1 \lambda_1 + w_2 \lambda_2 - 0.72 w_1 w_2 (\lambda_2 - \lambda_1)$$

D.12 Conductividad térmica de la fase gaseosa.

En el cálculo de las conductividades térmicas de los compuestos individuales, se utilizan las correlaciones de las conductividades térmicas, como función de la temperatura proporcionadas en la literatura⁸, se muestran en la tabla D.13.

Tabla D.13 Conductividad térmica de gases

$$\lambda_i = a + b T + c T^2 + d T^3, \text{ W/m}^\circ\text{K}$$

Compuesto	a x 10 ³	b x 10 ⁶	c x 10 ⁹	d x 10 ¹²
H ₂ O	7.341	-10.13	180.1	-91
CO ₂	-7.21	80.1	5.477	-10.53
N ₂	0.3919	98.16	-50.67	15.04
O ₂	-0.3273	99.66	-37.43	9.732
Ar	2.714	55.4	-21.78	5.528

Mason y Saxena⁶ sugirieron el siguiente procedimiento para calcular la conductividad térmica de mezclas gaseosas a bajas presiones.

$$\Gamma_i = 210 \sqrt{\frac{\Gamma_i M_i^2}{P C_i}}$$

$$\frac{\lambda_{M_i}}{\lambda_{M_j}} = \frac{\Gamma_i \left(e^{0.0464 \Gamma_i} - e^{-0.2412 \Gamma_i} \right)}{\Gamma_j \left(e^{0.0464 \Gamma_j} - e^{-0.2412 \Gamma_j} \right)}$$

$$A_{ij} = \frac{1 + \sqrt{\frac{\lambda_{M_i}}{\lambda_{M_j}} \sqrt{\frac{M_i}{M_j}}}}{\sqrt{1 + \frac{M_i}{M_j}}}$$

$$\lambda_m = \sum_{i=1}^n \frac{y_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^n y_j A_{ij}}$$

APÉNDICE E

MÉTODOS NUMÉRICOS

E.1 Algoritmo de Newton Multivariable .

El problema de encontrar las raíces de un sistema de ecuaciones no lineales se puede plantear como sigue:

Dado un sistema no lineal de n ecuaciones con n incógnitas.

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$\dots \dots \dots$$

$$f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

Determinar todas las raíces, significa encontrar los valores de x_i , que satisfacen las ecuaciones anteriores.

Para resolver el problema anterior las funciones f_i se expresan en series de Taylor, de donde se eliminan todos los términos no lineales.

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_1^0 + f_1^0 x_1 \Delta x_1 + f_1^0 x_2 \Delta x_2 + \dots + f_1^0 x_n \Delta x_n = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_2^0 + f_2^0 x_1 \Delta x_1 + f_2^0 x_2 \Delta x_2 + \dots + f_2^0 x_n \Delta x_n = 0$$

$$\dots \dots \dots$$

$$f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_n^0 + f_n^0 x_1 \Delta x_1 + f_n^0 x_2 \Delta x_2 + \dots + f_n^0 x_n \Delta x_n = 0$$

donde:

$$f_i^0 = f_i(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$$

$x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0$ = estimaciones iniciales de las raíces.

$$f_i^0 x_i = \partial f_i / \partial x_i, \text{ evaluada en } x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0$$

$$\Delta x_i = x_i - x_i^0$$

Las ecuaciones anteriores son un sistema de ecuaciones lineales, donde las incógnitas son todos los Δx_i . Este sistema de ecuaciones puede resolverse por cualquier método convencional, como el método de Gauss utilizado en este trabajo.

Una vez que determinados los Δx_i , los nuevos valores de x_i son:

$$x_i = x_i^* + \Delta x_i$$

A partir de los cuales se inicia nuevamente el procedimiento. En el caso de las conversiones de la MEA los cálculos terminan en el momento en que se cumple el siguiente criterio de convergencia.

$$|\sum f_i| < 1 \times 10^{-6}$$

Cabe hacer mención de las peculiaridades que tiene este método al programarse en computadora, sobre todo con lo que respecta a las derivadas parciales. Para evaluar las derivadas parciales en el programa se utiliza la definición de derivada parcial de la siguiente forma:

$$\partial f_i / \partial x_k = [f_i(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) - f_i(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)] / h$$

donde:

$$h = 1 \times 10^{-10}$$

Otro aspecto importante es la selección de las estimaciones iniciales x_i^* , pues las raíces en la mayoría de los casos depende de estas estimaciones. Para el caso del cálculo de las conversiones de MEA se toma como estimación inicial para todas las conversiones el valor de 1×10^{-4} , convergiendo las ecuaciones en todos los casos de interés.

E.2 Algoritmo de Gauss.

El algoritmo de Newton Multivariable utilizado para calcular las conversiones en equilibrio de la MEA, requiere resolver sistemas de ecuaciones lineales, lo cual se lleva a cabo con el método de Gauss con pivoteo parcial que se describe en la figura E.1, donde:

n = número de ecuaciones

a_{ij} = matriz de coeficientes aumentada con el vector de términos independientes

$a_{k,p+1}$ = solución de la k -ésima incógnita.

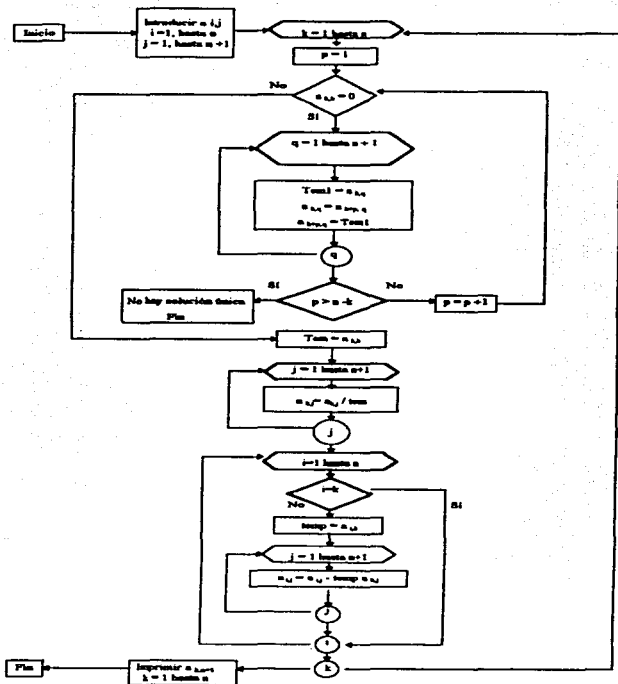


Figura E.1 Diagrama de flujo del algoritmo de Gatos

APÉNDICE F

TABLAS DE RESULTADOS

En las siguientes tablas se muestran los resultados experimentales y teóricos de la absorción del bióxido de carbono en soluciones acuosas de monoetanolamina.

Tabla F.1 Flujos de alimentación de la corrientes líquida y gaseosa para las columnas no adiabáticas sin serpentín

Corrida	ΔP placa [cmH ₂ O]	Flujo del gas [kg/h]	Lectura del rotámetro	Flujo del líquido [kg/h]	Flujo de líquido mínimo* [kg/h]	Porcentaje de inundación
1	2.7	5.46	1.5	15.14	7.48	47.6
2	2.7	5.56	1.5	15.09	12.75	47.6
3	2.7	5.61	2.5	33.03	14.38	60.2
4	2.7	5.64	1.5	15.45	41.01	47.7
5	2.8	5.74	2.0	24.41	18.62	55.0
6	2.7	5.47	1.0	6.52	7.24	39.8
7	2.9	5.68	1.5	15.49	8.90	49.0
8	3.6	6.36	2.0	24.45	11.50	60.0
9	2.5	5.27	1.0	6.24	4.96	38.5
10	2.5	5.27	1.5	15.21	8.45	46.3
11	2.5	5.27	2.0	24.19	9.29	52.8
12	2.6	5.69	1.0	6.11	7.87	39.0
13	2.6	5.73	2.0	24.08	18.55	53.4
14	2.6	5.74	2.5	33.08	20.59	59.4
15	2.4	5.29	1.0	6.14	6.53	37.7
16	2.4	5.31	1.5	15.14	11.71	45.5
17	2.4	5.31	2.0	24.13	11.89	52.0
18	2.2	4.89	1.0	6.31	5.11	36.5
19	2.2	4.86	1.0	6.31	5.07	36.5

1. Calculado a la temperatura de alimentación del líquido

ESTA COPIA NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Tabla F.2 Flujos de alimentación de las corrientes líquida y gaseosa para las corridas adiabáticas

Corrida	ΔP placa [cmH ₂ O]	Flujo del gas [kg/h]	Lectura del rotámetro	Flujo del líquido [kg/h]	Flujo de líquido mínimo ¹ [kg/h]	Porcentaje de inundación
20	2.3	5.01	1.0	6.32	5.02	37.2
21	2.3	4.97	1.0	6.33	4.28	37.2
22	2.3	4.98	1.5	15.31	5.65	44.9
23	2.1	4.83	1.0	6.32	7.05	35.8
24	2.1	4.83	1.5	15.29	9.81	43.4
25	2.1	4.83	2.0	24.28	10.92	49.8
26	2.1	4.93	1.0	6.34	3.56	35.8
27	2.1	4.95	1.5	15.31	14.06	43.9
28	2.1	4.91	2.0	24.26	15.47	49.8
29	3.4	6.25	1.5	15.32	17.16	52.0
30	3.4	6.24	2.0	24.27	21.41	58.8
31	2.1	4.95	1.5	15.40	14.04	43.4
32	2.1	4.95	1.5	15.39	14.10	43.4
33	2.1	4.95	1.5	15.40	13.25	43.4

1. Calculado a la temperatura de alimentación del líquido

Tabla F.3 Flujos de alimentación de las corrientes líquida y gaseosa para las corridas no adiabáticas con serpentín.

Corrida	ΔP placa [cmH ₂ O]	Flujo del gas [kg/h]	Lectura del rotámetro	Flujo del líquido [kg/h]	Flujo de líquido mínimo ¹ [kg/h]	Porcentaje de inundación
34	2.1	4.96	1.5	15.26	10.40	43.4
35	2.0	4.85	1.5	15.26	11.55	42.7
36	2.1	4.96	1.5	15.26	11.39	43.4
37	2.1	4.90	1.5	15.19	11.02	43.4
38	2.1	4.90	1.5	15.19	11.57	43.4

1. Calculado a la temperatura de alimentación del líquido

Tabla F.4 Composiciones de la corriente gaseosa y por ciento de absorción para las corridas no adiabáticas sin serpentín

Corrida	Fracción mol del CO ₂ en el gas				Porcentaje de absorción		
	Alimentación	Salida			Experimental	Teórico ¹	Teórico ²
	Experimental	Teórica ¹	Teórica ²				
1	0.120	0.056	0.0638	0.0671	56.5	50.0	47.3
2	0.210	0.094	0.1247	0.1342	61.0	46.4	41.7
3	0.210	0.078	0.0875	0.0941	68.2	63.9	60.9
4	0.228	0.128	0.1576	0.1631	50.3	36.7	34.0
5	0.228	0.092	0.1422	0.1479	65.7	43.9	41.2
6	0.098	0.048	0.0646	0.0681	53.6	36.4	32.7
7	0.110	0.050	0.0682	0.0703	57.4	40.8	38.8
8	0.110	0.040	0.067	0.068	66.3	41.9	41.0
9	0.114	0.072	0.0675	0.074	39.7	43.7	37.9
10	0.114	0.040	0.069	0.0649	67.6	42.4	46.1
11	0.114	0.032	0.057	0.0591	74.3	53.0	51.2
12	0.336	0.272	0.2931	0.3000	26.2	18.1	15.3
13	0.336	0.164	0.2182	0.2304	61.2	41.2	40.8
14	0.336	0.140	0.1812	0.1959	67.8	56.3	51.9
15	0.176	0.116	0.1272	0.1372	38.6	31.8	25.6
16	0.176	0.062	0.1063	0.1121	69.1	44.3	40.9
17	0.176	0.060	0.0974	0.1017	70.1	49.5	47.0
18	0.060	0.016	0.0221	0.0269	74.5	64.6	56.7
19	0.060	0.016	0.022	0.0269	74.5	64.8	56.7

1. No isotérmico, desviación 24.2%; 2. Isotérmico a la temperatura de alimentación del líquido, desviación 29.4%

Tabla F.5 Composiciones de la corriente gaseosa y porcentaje de absorción para las corridas adiabáticas

Corrida	Fracción mol del CO ₂ en el gas				Porcentaje de absorción		
	Alimentación	Salida			Experimental	Teórico ¹	Teórico ²
		Experimental	Teórica ¹	Teórica ²			
20	0.070	0.028	0.0294	0.0348	61.7	59.8	52.1
21	0.064	0.028	0.0262	0.0312	57.9	60.7	52.9
22	0.064	0.016	0.0338	0.0349	76.2	48.8	47.1
23	0.124	0.060	0.0792	0.0853	54.9	39.2	34.1
24	0.124	0.032	0.0666	0.0702	76.6	49.6	46.7
25	0.124	0.020	0.0627	0.0634	85.6	52.7	50.6
26	0.190	0.160	0.1423	0.1515	18.8	29.3	23.9
27	0.200	0.068	0.1202	0.1277	70.8	45.4	41.44
28	0.200	0.052	0.1041	0.1105	78.1	53.5	50.3
29	0.220	0.100	0.1481	0.1550	60.6	38.4	35.0
30	0.220	0.064	0.1318	0.1384	75.8	46.2	43.0
31	0.200	0.076	0.1245	0.1311	67.1	43.1	39.6
32	0.200	0.076	0.1224	0.1292	67.1	44.2	40.7
33	0.200	0.084	0.1244	0.1311	63.3	43.2	39.6

1. No isotérmico desviación 31.9%, 2. Isotérmico a la temperatura de alimentación del líquido desviación 34.8%

Tabla F.6 Composiciones de la corriente gaseosa y porcentaje de absorción para las corridas no adiabáticas con serpiente

Corrida	Fracción mol del CO ₂ en el gas				Porcentaje de absorción		
	Alimentación	Salida			Experimental	Teórico ¹	Teórico ²
		Experimental	Teórica ¹	Teórica ²			
34	0.180	0.086	0.0982	0.1062	57.2	50.4	45.9
35	0.188	0.080	0.1008	0.1097	62.4	51.6	46.8
36	0.184	0.080	0.1009	0.1093	61.4	50.2	45.6
37	0.180	0.072	0.0976	0.1051	64.7	50.7	46.5
38	0.186	0.072	0.1018	0.1096	66.0	50.4	46.1

1. No isotérmico desviación 19.4%, 2. Isotérmico a la temperatura de alimentación del líquido desviación 26.5%

Tabla F.7 Composiciones de la corriente líquida para las corridas no adiabáticas sin serpentín

Corrida	Alimentación		Salida	
	Fracción peso	Molaridad	Molaridad	
			Experimental	Teórica
1	0.1670	2.74	0.58	1.42
2	0.1730	2.85	1.12	0.77
3	0.1730	2.85	1.84	1.52
4	0.1336	2.20	0.58	0.42
5	0.1336	2.20	1.10	0.82
6	0.1305	2.15	0.60	0.19
7	0.1305	2.15	1.26	1.11
8	0.1305	2.15	0.62	1.40
9	0.1608	2.65	0.45	0.15
10	0.1608	2.65	1.55	1.46
11	0.1608	2.65	2.10	1.83
12	0.1756	2.90	0.46	0.15
13	0.1756	2.90	1.20	0.89
14	0.1756	2.90	1.60	1.08
15	0.1725	2.85	0.65	0.17
16	0.1725	2.85	1.40	1.23
17	0.1725	2.85	2.35	1.70
18	0.1530	2.52	1.03	0.60
19	0.1530	2.52	0.96	0.58

Tabla F.8 Composiciones de la corriente líquida para las corridas adiabáticas

Corrida	Alimentación		Salida	
	Fracción peso	Molaridad	Molaridad	
			Experimental	Teórica
20	0.1517	2.50	1.30	0.38
21	0.1516	2.50	0.80	0.52
22	0.1516	2.50	1.90	1.84
23	0.1528	2.52	0.56	0.19
24	0.1529	2.52	1.44	1.30
25	0.1528	2.52	1.80	1.71
26	0.1504	2.48	0.32	0.12
27	0.1504	2.48	1.12	0.74
28	0.1506	2.48	1.48	1.19
29	0.1459	2.40	0.76	0.42
30	0.1459	2.40	1.36	0.89
31	0.1408	2.32	0.96	0.66
32	0.1408	2.32	1.00	0.64
33	0.1408	2.32	1.00	0.66

Tabla F.9 Composiciones de la corriente líquida para las corridas no adiabáticas con serpentín

Corrida	Alimentación		Salida	
	Fracción peso	Molaridad	Molaridad	
			Experimental	Teórica
34	0.1531	2.52	1.4	0.78
35	0.1531	2.52	1.36	0.73
36	0.1531	2.52	1.32	0.73
37	0.1627	2.68	1.40	0.93
38	0.1627	2.68	1.48	0.89

Tabla F.10 Temperaturas de las corrientes líquida y el gaseosa para las corridas no adiabáticas sin serpentín

Corrida	Líquido [°K]			Gas [°K]			
	Alimentación	Salida		Alimentación	Salida		Ambiente [°K]
		Experimental	Teórica		Experimental	Teórica	
1	293.15	305.15	303.5	291.15	298.15	295.6	291.15
2	292.15	304.15	310.5	293.15	298.15	296.5	291.15
3	292.15	303.15	303.7	288.15	295.15	293.4	288.15
4	289.15	301.15	304.9	287.15	296.15	293.4	287.15
5	289.15	302.15	300.8	287.15	293.15	291.7	287.15
6	286.15	286.15	300.2	287.15	289.15	289.1	287.15
7	286.15	293.15	294.8	287.15	291.15	288.0	287.15
8	286.15	294.15	292.0	283.15	289.15	287.2	283.15
9	289.15	289.15	304.7	289.15	295.15	294.1	289.15
10	289.15	295.15	299.1	289.15	295.15	291.0	289.15
11	289.15	297.15	295.8	289.15	292.15	290.4	289.15
12	285.15	284.15	304.1	285.15	293.15	292.3	285.15
13	285.15	301.15	302.8	281.15	290.15	288.2	286.15
14	285.15	299.15	301.2	280.15	288.15	287.5	286.15
15	284.15	285.15	304.5	284.15	291.15	289.0	284.15
16	283.15	296.15	297.1	281.15	290.15	285.8	284.15
17	283.15	295.15	293.0	282.15	287.15	284.8	284.15
18	288.15	290.15	305.3	291.15	297.15	289.8	291.15
19	288.15	289.15	305.6	292.15	297.15	289.8	292.15

Tabla F.11 Temperaturas de las corrientes líquida y el gasosa para las corridas adiabáticas.

Corrida	Líquido [°K]			Gas [°K]		
	Alimentación	Salida		Alimentación	Salida	
		Experimental	Teórica		Experimental	Teórica
20	289.15	286.15	308.2	288.15	290.15	291.9
21	286.15	288.15	306.9	292.15	292.15	287.9
22	285.15	297.15	291.3	291.15	293.15	286.1
23	286.15	289.15	309.3	289.15	303.15	289.1
24	287.15	300.15	298.1	291.15	292.15	289.0
25	285.15	297.15	292.5	292.15	290.15	286.2
26	287.15	287.15	308.7	288.15	303.15	291.3
27	287.15	299.15	303.0	288.15	294.15	290.2
28	290.15	303.15	301.7	292.15	294.15	292.1
29	294.15	304.15	312.7	293.15	299.15	299.2
30	294.15	308.15	308.5	294.15	297.15	297.2
31	286.15	300.15	301.0	287.15	292.15	289.1
32	288.15	302.15	303.5	288.15	292.15	291.4
33	286.15	300.15	301.1	288.15	291.15	289.0

Tabla F.12 Temperaturas de las corrientes líquida y el gasosa para las corridas no adiabáticas con serpentín.

Corrida	Líquido [°K]			Gas [°K]			Serpentín [°K]
	Alimentación	Salida		Alimentación	Salida		
		Experimental	Teórica		Experimental	Teórica	
34	292.15	300.15	309.2	292.15	295.15	295.9	305.15
35	293.15	304.15	310.9	292.15	298.15	297.1	307.7
36	292.15	302.15	309.7	292.15	297.15	296.0	307.7
37	291.15	293.15	307.3	291.15	294.15	294.0	292.15
38	291.15	297.15	307.7	292.15	294.15	293.9	292.15

Tabla F.13 Caída de presión en la columna y factor de empaque para las corridas no adiabáticas sin serpentín

Corrida	Factor de empaque [1/ft]	ΔP torre [cmH ₂ O] experimental	ΔP torre [cmH ₂ O] teórica
1	1513.7	3.3	3.5
2	1592.9	3.5	3.5
3	1154.3	3.8	5.8
4	1404.5	3.0	3.5
5	1223.3	3.4	4.8
6	1704.0	2.7	2.5
7	1559.1	3.7	3.8
8	1144.9	4.0	6.2
9	1989.6	3.0	2.3
10	1609.4	3.3	3.2
11	1361.8	3.5	4.3
12	1986.5	3.1	2.3
13	1360.7	3.6	4.4
14	1144.4	3.6	5.6
15	2125.5	3.1	2.2
16	1591.5	3.1	3.1
17	1286.7	3.1	4.1
18	1862.6	2.4	2.0
19	2862.4	2.4	2.0

Tabla F.14 Caída de presión en la columna y factor de empaque para las corridas adiabáticas

Corrida	Factor de empaque [1/R]	ΔP torre [cmH ₂ O] experimental	ΔP torre [cmH ₂ O] teórica
20	1792.1	2.4	2.1
21	1442.0	1.9	2.1
22	1514.5	2.8	3.0
23	1638.6	2.0	1.9
24	1758.3	3.1	2.7
25	1412.9	3.1	3.6
26	2002.0	2.5	1.9
27	1583.7	2.7	2.7
28	1378.0	3.0	3.6
29	1317.9	3.5	4.5
30	1172.5	3.9	5.8
31	1582.2	2.7	2.7
32	1581.3	2.7	2.7
33	1582.0	2.7	2.7

Tabla F.15 Caída de presión en la columna y factor de empaque para las corridas no adiabáticas con serpentín

Corrida	Factor de empaque [1/R]	ΔP torre [cmH ₂ O] experimental	ΔP torre [cmH ₂ O] teórica
34	1731.5	3.0	2.7
35	1869.0	3.2	2.6
36	1842.7	3.3	2.7
37	1759.8	3.1	2.7
38	1845.6	3.3	2.7

APÉNDICE G

PRÁCTICA DE LABORATORIO

OBJETIVO.

Apreciar el efecto del equilibrio termodinámico inherente a la operación de un absorbedor en su capacidad.

PROBLEMA.

Determinar el flujo de solvente necesario (solución acuosa de monoetanolamina) para llevar a cabo una recuperación del 40% del dióxido de carbono contenido en una corriente gaseosa (aire), mediante absorción continua a contracorriente en una columna empacada, bajo condiciones de operación adiabática por un lado, y por otro lado, bajo condiciones isotérmicas (una a la temperatura del solvente a la entrada y otra a la temperatura de salida del solvente absorbedor, durante la operación adiabática)

DESARROLLO EXPERIMENTAL

Operación adiabática

1. Colocar los carretes de aislamiento
2. Preparar una solución acuosa de MEA de concentración comprendida entre 10 y 15 % peso en el tanque de almacenamiento FA-1
3. Suministrar la corriente de aire a la columna, alineando el suministro desde la compresora hasta la válvula reguladora de presión en la corriente 2
4. Con la válvula reguladora de presión, fijar una presión de 1 kg/cm^2 en la corriente 2
5. Establecer el flujo de la corriente de aire, fijando una caída de presión en la placa de orificio de 3 cm de H_2O aproximadamente
6. Alimentar el CO_2 a la corriente 2, a través de la corriente 3, para formar la corriente gaseosa de alimentación a la columna (corriente 6)
7. Verificar que la corriente gaseosa de alimentación tenga una concentración aproximada de 30 % volumen de CO_2 , sino ajustar el suministro del CO_2 en la corriente 3 hasta que se cumpla esta condición.
8. Suministrar la corriente de solvente a la columna, alineando el suministro desde el tanque FA-1, pasando por la bomba GA-1, hasta el rotámetro en la corriente 1
9. Fijar el flujo de la corriente líquida de alimentación (corriente 1), colocando la lectura del rotámetro en la posición correspondiente al flujo mínimo del líquido
10. Checar las condiciones hidráulicas de la torre, esto es, verificar que el porcentaje de inundación sea menor o aproximadamente igual al 60%, si este no es el caso, se detiene el experimento

11. Para establecer el régimen permanente, registrar la temperatura de la corriente gaseosa de salida (corriente 4) cada 5 minutos, hasta que no se presente una variación significativa entre dos registros consecutivos.

12. Determinar la composición de la corriente gaseosa de salida (corriente 4)

13. Registrar la temperatura de la corriente gaseosa de alimentación (corriente 6)

14. Determinar la composición de la corriente líquida de salida (corriente 5)

15. Registrar la temperatura de la corriente líquida de alimentación (corriente 1)

16. Cambiar la posición del rotámetro para fijar un mayor flujo de la corriente líquida de alimentación.

17. Repetir los pasos del 10 al 16

Operación isotérmica a baja temperatura

1. Colocar los serpentines de enfriamiento a lo largo de la torre

2. Proceder de la misma manera que en el caso adiabático para los puntos 2 al 10.

3. Mediante el ajuste del flujo del agua al serpentín en cada sección, mantener la temperatura interna de la columna a la temperatura de alimentación de la corriente líquida de las corrientes adiabáticas.

4. Proceder de la misma manera que en el caso adiabático para los puntos 11 al 17

Operación isotérmica a alta temperatura.

1. Colocar los serpentines de enfriamiento a lo largo de la torre

2. Proceder de la misma manera que en el caso adiabático para los puntos 2 al 10.

3. Mediante el ajuste del flujo del agua al serpentín en cada sección, mantener la temperatura interna de la columna a unos 20 grados por encima de la temperatura de alimentación de la corriente líquida de las corrientes adiabáticas.

4. Proceder de la misma manera que en el caso adiabático para los puntos 11 al 17.

CUESTIONARIO.

1. ¿ De qué forma el aumento de temperatura en el sistema de absorción afecta la solubilidad del CO_2 en el solvente ?

2. ¿ En qué tiempo se alcanza el régimen permanente ?

3. ¿Cuál es el valor de las recuperaciones del CO_2 obtenidas en función de los flujos de solvente empleados dentro del rango establecido ?

4. ¿ Bajo qué condiciones se operación se logra la recuperación especificada, con un menor uso de solvente ?

5. ¿ Por qué un flujo de solvente diferente se obtiene para dar la recuperación requerida en cada caso ?

NOMENCLATURA

a	área interfacial por volumen de lecho empacado, m ² /m ³
B	segundo coeficiente binomial
B ^a y B ^b	parámetros de la correlación para el segundo coeficiente binomial de Triantopoulos.
B _m	segundo coeficiente binomial de mezcla
C	coeficiente de flujo
C _i	concentración del compuesto i, kmol/m ³
C _s	función del porcentaje de mundación
CO ₂	dióxido de carbono
C _p i	capacidad calorífica del compuesto i, J/gmol °K.
C _T	concentración total, kmol/m ³
C ₁ b	concentración en equilibrio del CO ₂ en el seno de la fase líquida, kmol/m ³
C ₂ ^a	concentración inicial de la MEA, kmol/m ³
C ₁ ^a	concentración interfacial del CO ₂ , kmol/m ³
d _e	diámetro exterior de la columna, m
d _o	diámetro interno del orificio, cm
d _i	diámetro interno de la tubería, cm
d _s	diámetro de una esfera de la misma superficie que una única partícula de empaque.
D	diámetro más pequeño de la torre, m
D _i	difusividad del compuesto i, m ² /s
D _{ij}	coeficiente de difusión binario, m ² /s
D _{im}	coeficiente de difusión del compuesto i en la mezcla
E	factor de aceleración
F	factor de empaque, ft ⁻¹
g _c	constante gravitacional, 32.174 ft/s ² o 9.81 m/s ²
G	flujo másico, lb/ hr
G _m	velocidad másica molar del gas, kmol/m ² s
Gr	número de Grahnof
G _s	velocidad másica del gas, kg /m ² s
G _s ^a	velocidad másica del gas, lb/ft ² s
h _{aw}	coeficiente de transferencia de calor convectivo para el aire, W/m ² °K
h _g	coeficiente de transferencia de calor del gas, W / m ² °K
h _l	coeficiente de transferencia de calor del líquido, W/m ² °K
Ha	número de Hatta

H_{CO_2}	constante de Henry para el CO_2 proporcionado por Kent
H_i'	calor de formación del compuesto i en la fase líquida.
H_i^g	calor de formación del compuesto i en la fase gaseosa.
H_g	entalpía molar de la mezcla gaseosa, J/kmol
H_l	entalpía molar de la mezcla líquida, J/kmol
HTU_m	altura de una unidad de transferencia de la fase m
k	conductividad térmica
k_c	conductividad térmica de la coraza, $1.09 \text{ W / m }^\circ\text{K}$
k_g	coeficiente de transferencia de masa del componente i en el gas, $\text{kmol/m}^2\text{s}$
k_{ij}	parámetro de interacción binaria
k_L	coeficiente de transferencia de masa del componente i en el líquido, $\text{kmol/m}^2\text{s}$
k_1	constante de velocidad de reacción directa, $\text{m}^3/\text{kmol s}$
k_2	constante de velocidad de reacción inversa, $\text{m}^3/\text{kmol s}$
L	velocidad mássica del líquido $\text{lb/ft}^2\text{hr}$
Loc	lectura del rotámetro
Li	flujo volumétrico del líquido, ml/s
Lm	velocidad mássica molar del líquido, $\text{kmol/m}^2\text{s}$
Ls	velocidad mássica del líquido, $\text{kg/m}^2\text{s}$
La^*	velocidad mássica del líquido, $\text{lb/ft}^2\text{s}$
MEA	monoetanolamina, $\text{HOC}_2\text{H}_4\text{NH}_2$
M_i	peso molecular del compuesto i
M_m	peso molecular de la mezcla.
N_i	flux del compuesto i , $\text{kmol/m}^2 \text{ s}$
Nu	número de Nusselt, $h_L ds / \lambda_L$
Nu_p	número de Nusselt promedio
$N_{i,s}$	flujo de por unidad de volumen de lecho empacado, $\text{Kmol/m}^3\text{s}$
$N_{i,l=0}$	flux del CO_2 sin presencia de reacciones químicas, evaluado en la interfase, $\text{kmol/m}^2\text{s}$
$N_{i,l=0}^*$	flux del CO_2 en presencia de reacciones químicas, evaluado en la interfase, $\text{kmol/m}^2 \text{ s}$
P	presión del sistema, bar
P^o	presión de vapor del agua, bar
P_c	presión crítica, bar
$P_{c,i}$	presión crítica del compuesto i , bar
Pr_m	número de Prandtl de la fase m , $\mu_m Cp_m / \lambda_m$
PIN	porcentaje de intundación.
q	parámetro que depende de la naturaleza del compuesto orgánico ($q=2$ para la MEA)

qr	transferencia de calor a través de la interfase liquido-gas, W/m ²
Q	transferencia de calor de la columna con los alrededores, W/m ²
r	coeficiente de correlación
r ₁	radio interior de la columna, m
r ₂	radio exterior de la columna, m
R	constante universal de los gases
Re _m	número de Reynolds de la fase m
Sc _m	número de Schmidt, $\mu_m / D_{12} \rho_m$
Sh	número de Sherwood, $k_g d / D_{12}$
St _g	número de Stanton, $h_g / C_p G_m$
T	temperatura del sistema, °K
Tc	temperatura crítica, °K
Tc _i	temperatura crítica del compuesto i, °K
TF	factor de corrección Ackermann
T _g	temperatura del gas, °K
T _i	temperatura en la interfase
T _l	temperatura del liquido, °K
To	temperatura de referencia, 283.15 °K
Tr	temperatura reducida
Tr _i	temperatura reducida del compuesto i
Ts	temperatura en el exterior de la columna, °K
U	coeficiente global de transferencia de calor, W/m ² °K
vi	coeficiente estequiométrico del compuesto i
V ^e	volumen molar de exceso, cm ³ /gmol
Vc	volumen crítico, cm ³ /gmol
Vm	Volumen molar de la mezcla líquida, cm ³ /gmol
V _i	volumen molar del compuesto i, cm ³ / gmol
w _i	fracción peso del compuesto i
x _i	fracción mol del compuesto i en el líquido.
x _i [*]	fracción mol del compuesto i en el líquido.
x _i	fracción mol del compuesto i en todas sus formas en la fase líquida.
x _{1b}	fracción mol del agua en el seno de la fase líquida
X	altura del lecho empacado, m
X _i	kmol de MEA que reaccionaron en la reacción i / kmol de MEA iniciales
y _i	fracción mol del componente i en la fase gaseosa.

y_i	fracción mol del componente i en el seno de la fase gaseosa.
y_i^*	fracción mol del compuesto i en la interface
Y	factor de expansión para flujo compresible
Y_1	kmol de CO ₂ iniciales / kmol de MEA iniciales
Y_2	kmol de H ₂ O iniciales / kmol de MEA iniciales
Z_c	coeficiente de compresibilidad crítica
Z_m	factor de compresibilidad de la mezcla

Letras griegas

β	coeficiente de expansión térmica, 1/ ^o K
δ	parámetro para el calculo del coeficiente virial
$\Delta H_v i$	calor latente de vaporización del compuesto i , J/Kmol
$\Delta H_v^0 i$	calor latente de vaporización a la temperatura de referencia.
$\Delta H_v i, j$	calor latente de vaporización del compuesto i a la temperatura j , cal / gmol.
$\Delta H_{R, j}$	calor de reacción, cal/gmol
ΔH_s	calor de solución
ΔP	caída de presión en el orificio en lb/ft ²
ΔT	diferencia de temperaturas entre el aire y la superficie exterior de la columna, T _o - T _i
ϵ	porosidad del empaque
ϵ / k	parámetro de energía, ^o K
$(\epsilon/k)_c$	parámetro de energía cruzado, ^o K
ϕ	parámetro de empaque para la altura de una unidad de transferencia del líquido, m
η_i	momento dipolar del compuesto i en debyes
η_{im}	momento dipolar relativo de la mezcla
η_m	momento dipolar de la mezcla
φ_e	retención estática
φ_{ea}	retención estática del agua
φ_o	retención operacional
φ_{oa}	retención operacional del agua
φ_t	retención total
φ_{ta}	retención total del agua
κ_i	factor de asociación de Chug
λ_i	conductividad térmica del compuesto i , W/m ^o K.
λ_m	conductividad térmica de la mezcla, W / m ^o K

λ_1	conductividad térmica mas pequeña, W / m °K
λ_2	conductividad térmica mas grande, W / m °K
μ_g	viscosidad del gas en lb/ft hr
μ_m	viscosidad de la fase m, mPa s
ρ_g	densidad del gas, Kg /m ³
ρ_g^*	densidad del gas, lb/ft ³
ρ_l	densidad del liquido, kg /m ³
ρ_l^*	densidad del liquido, lb/ft ³
σ	diámetro de colisión, Å
σ_i	tensión superficial, N/m
σ_{AB}	diámetro de colisión, m
σ_i	tensión superficial del compuesto i, dinas / cm
ψ	parámetro de empaque para la altura de una unidad de transferencia del gas, m
ψ_i	fracción volumen del bulto del compuesto i.
ψ_i^s	fracción volumen del compuesto i en la capa superficial
Ω_D	integral de colisión
ω_i	factor acéntrico del compuesto i

Subíndices

a	agua
air	aire
g	gas
l	liquido
o	orgánico
p	productos
r	reactivos
1	CO ₂
2	HOC ₂ H ₄ NH ₂
3	HOC ₂ H ₄ NH ₃ ⁺
4	HOC ₂ H ₄ NCHOO ⁻
5	H ₂ O
6	HCO ₃ ⁻
7	CO ₃ ²⁻
8	OH ⁻

BIBLIOGRAFÍA

Libros.

1. Karlekar y R. M. Desmond, "Transferencia de Calor", 2a, Mc Graw Hill, México, pp 624,625,772, 1985
2. Crane, "Flujo de fluidos en valvulas, accesorios y tuberías", Mc Graw Hill, México pp.2-17, 1985
3. Reklaitis y D. R. Schneider, "Balances de Materia y Energía", McGraw-Hill, México, p. 627, 1982
4. Welty, "Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa", Lamusa, México, pp. 824,825,829, 1993
5. Bird, W. E. Stewart y E. N. Lightfoot, "Fenómenos de Transporte", Reverté, España, pp. 1-8 y 1-9, (1982)
6. Reid, John K. Prausnitz and B. E. Poling, "The Properties of Gases and Liquids", 4th, Mc GrawHill, Singapore, 388-652, 1988
7. Treybal, A. Garcia Rodriguez y F. J. Lozano, "Operaciones de Transferencia de Masa", 2a, Mc Graw Hill, México, pp. 213-235, 1994
8. Maddox y A.L.Hines, "Transferencia de Masa Fundamentos y Aplicaciones". Prentice-Hall, México, pp. 24-25, 1987
9. Chapra y R. P. Canale, "Metodos Numericos para Ingenieros", Mc Graw Hill, México pp. 254-291, 1994
10. Maron y C. F. Pritton, "Fundamentos de Fisicoquímica", Lamusa, México, p. 813, 1984,
11. Walas, "Phase Equilibria in Chemical Engineering", Butterworth Publishers, USA, pp. 109-161, 596-597, (1984)
12. Mc Cabe, J. C. Smith y P. Harriott, "Operaciones Básicas de Ingeniería Química" 4a, Mc Graw Hill, España, pp. 717-733, 1991

Revistas

13. Escoe, Hydrocarbon Processing, January, pp. 107-112, (1983)
14. Chyuan-Chung and Andrew Ng, *Hydrocarbon Processing*, April, 122-126, (1980)
15. Constantine Tsionopoulos, *AIChE J.*, 20, 2, 263-272, (1974)
16. David M. Austgen, Gary T. Rochelle, Xiao Peng and Chau-Chyun Chen, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 28, 1060-1073, (1989)
17. David M. Austgen, Gary T. Rochelle and Chau-Chyun Chen, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 30, 543-555, (1991)
18. Denis J. Zigrang and Nicholas D. Sylvesteret, *Chem. Eng.*, February, 3, (1985)
19. Edward B. Rinker, Sami S. Ashour and Orville C. Sandall, *Chem. Eng. Sci.*, 50, 5, 755-768, (1995)
20. Erdogan Alper, *Chem. Eng. Sci.*, 28, 2092-2093, (1973)
21. Erwin D. Snijder, Marcel J. M. te Ruele, Gert F. Versteeg and Wim P. M. van Swaaij, *J. Chem. Eng. Data*, 38, 475-480, (1993)

22. Ceert F. Versteeg and Wim P. M. van Swaaij, *J. Chem. Eng. Data*, **33**, 29-34, (1988)
23. Versteeg, J. A. Kuipers, F. P. H. Van Beckum and W. P. M. Van Swaaij, *Chem. Eng. Sci.*, **44**, 2295-2310, (1989)
24. Versteeg, J. A. Kuipers, F. P. H. Van Beckum and W. P. M. Van Swaaij, *Chem. Eng. Sci.*, **45**, 183-197, (1990)
25. Gianni Astanta and David W. Savage, *Chem. Eng. Sci.*, **35**, 1755-1764, (1980)
26. Hairo Hikita, Satoru Asai, Yoshio Katsu and Seichi Ikuno, *AIChE J.*, **25**, 5, 793-800, (1979)
27. Hung Xuan Nguyen, *Hydrocarbon Processing*, February, 101-103, (1979)
28. Keh-Peng Shen and Meng-Hui Li, *J. Chem. Eng. Data*, **37**, 96-100, (1992)
29. Onda, E. Sada, T. Kobayashi and M. Fujino, *Chem. Eng. Sci.*, **25**, 753-760, (1970)
30. Max Leva, *Chem. Eng. Progress*, January, 65-72, (1992)
31. Men-Hui Li and Shen, K. P. *J. Chem. Eng. Data*, **37**, 288, (1992)
32. Men-Hui Li and Yen-Chung Lie *J. Chem. Eng. Data*, **39**, 444-447, (1994)
33. Mommesan and C. D. Holland, *Hydrocarbon Processing*, November, 195-200, (1983)
34. Baluwhoff, G. F. Versteeg and W. P. M. Van Swaaij, *Chem. Eng. Sci.*, **39**, 2, 207-225, (1984)
35. Ralph M. DiGuillo, Rong-Jwyn Lee, Steven T. Schaeffer, Laura L. Brasher and Amyn S. Teja, *J. Chem. Eng. Data*, **37**, 239-242, (1992)
36. Ralph M. DiGuillo, William L. McGregor and Amyn S. Teja, *J. Chem. Eng. Data*, **37**, 242-245, (1992)
37. Ramanathan R. Tarakad, *AIChE J.*, **23**, 5, 685, (1977)
38. Raymond L. Kent y Benjamin Eisenberg, *Hydrocarbon Processing*, February, 87-90, (1986)
39. Weiland, M. Rawal and R. G. Rice, *AIChE J.*, **28**, 6, 963-973, (1982)
40. Laddha and P. V. Dackwerts, *Chem. Eng. Sci.*, **36**, 479-482, (1981)
41. Sing-Hang Hsu, *Hydrocarbon Processing*, July, 89-90, (1985)
42. Chakravarty, U. K. Phukan and R. H. Weiland, *Chem. Eng. Prog.*, April, 32-36, (1985)
43. Vital, S. S. Grossel and P. Y. Olsen, *Hydrocarbon Processing*, December, pp. 75-78, (1984)
44. Sherwood, G. H. Shipley and F. A. L. Holloway, *Ind. Eng. Chem.*, **30**, 7, 765-769, (1938)
45. Urs v. Stockar and Charles R. Wilke, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **16**, 1, 88-93, (1977)
46. Yi-Gui Li and Alan E. Mather, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **33**, 2006-2015, (1994)

Enciclopedias.

47. Perry, "Manual del Ingeniero Químico", Medidores de flujo, 6a, Mc Graw Hill, México, Vol. II, pp. 5-16, 1993.